



TU Clausthal

Zeitadaptive Finite-Elemente-Berechnungen thermomechanisch gekoppelter Problemstellungen sowie Mortarkontakt

D i s s e r t a t i o n

zur Erlangung des Doktorgrades
der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Matthias Grafenhorst
aus Nordhausen
(Geburtsort)

genehmigt von der Fakultät für
Mathematik/Informatik und Maschinenbau,
der Technischen Universität Clausthal,

Tag der mündlichen Prüfung
11.10.2018

Dekan

Prof. Dr.-Ing. Volker Wesling

Vorsitzender der Promotionskommission

Prof. Dr.-Ing. Alfons Esderts

Betreuer

Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Hartmann

Gutachter

Prof. Dr.-Ing. habil. Peter Wriggers

Leibniz Universität Hannover

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit von 2011 bis 2018 als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Mechanik der TU Clausthal.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann für die Anregung zu dieser Arbeit, für die Förderung und Motivation während der gesamten Zeit meiner Forschungstätigkeit sowie für die Übernahme des Hauptreferats.

Prof. Dr.-Ing. Peter Wriggers danke ich recht herzlich für das Interesse an meiner Arbeit und für die bereitwillige Übernahme des Koreferats.

Meinen Kollegen M.Sc. Pranav Kumar Dileep, M.Sc. Rose Rogin Gilbert, M.Sc. Ali Kheirimarghzar, Dipl.-Ing. Chris Leistner, Dipl.-Ing. Maria Angeles Martinez Page, M.Sc. Jithin Mohan danke ich für das freundschaftliche und produktive Arbeitsklima am Institut, die große Hilfsbereitschaft, die zahlreichen fachlichen Diskussionen, vor allem aber auch für die gemeinsamen Mittags- und Kaffeepausen. Insbesondere meinem ehemaligen Zimmerkollegen Dipl.-Ing. Chris Leistner spreche ich meinen Dank für die zahlreichen fachlichen und nichtfachlichen Diskussionen aus, von denen ich stets profitieren konnte. Die gemeinsamen Laufabende mit ihm waren eine willkommene Ablenkung zum Alltagsgeschehen.

Weiterhin möchte ich nicht versäumen, mich bei meinen ehemaligen Kollegen Dr.-Ing. Raad Al-Kinani, Dr.-Ing. Stephan Krämer, Dr.-Ing. Torben Netz, Dr.-Ing. Steffen Rothe und Dr.-Ing. Carmen Sguazzo für die vielen Gespräche der Aufmunterung, den unzähligen Diskussionen und zahlreichen Anregungen während meiner wissenschaftlichen Arbeitsperiode zu bedanken.

Darüber hinaus haben einige Studenten meine Arbeit bereichert. Insbesondere möchte ich M.Sc. Jianye Shi für das große Engagement bei seiner Masterarbeit meinen Dank aussprechen.

Von ganzem Herzen danke ich meiner lieben Freundin Maren für die liebevolle und motivierende Unterstützung während meiner Promotion, die sehr viel Glück und Freude in mein Leben gebracht hat und mich meist in kürzester Zeit auf andere Gedanken brachte. Auch ihren Eltern gebührt großer Dank für das sorgfältige Korrekturlesen.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meinen Eltern, meinem Bruder und seiner Frau sowie bei meiner Großmutter für ihren Rückhalt bedanken. Ein großer Anteil am Gelingen dieser Arbeit gebührt meiner liebevollen Mutter Ute Grafenhorst, die unermüdlich zur Reduktion der Fehler in der Dissertation beigetragen hat. Aus dem privaten Umfeld möchte ich mich schließlich noch bei meinem Cousin Carsten König bedanken, der im Schlusspurt dieser Arbeit das Korrekturlesen übernahm.

Vielen Dank!

Clausthal, im Juni 2018

Matthias Grafenhorst

Kurzzusammenfassung

Eine wesentliche Aufgabe im heutigen Ingenieursalltag ist die optimale Auslegung und betriebsnahe Dimensionierung von technischen Bauteilen. Dabei wird im Rahmen der Bemessung eines Bauteils dem Aspekt Leichtbau eine zunehmende Bedeutung eingeräumt. Damit dennoch bei den geringen Sicherheitsreserven auftretende Lasten risikolos abgeleitet werden können und die Funktion der technischen Komponenten nicht beeinträchtigt wird, sind hochgenaue Vorhersagen zum Verhalten der physikalischen Systeme erforderlich. In diesem Kontext hat sich, getrieben durch die rasante Entwicklung der Computertechnologie, die computergestützte numerische Simulation als leistungsfähige Alternative zu standardisierten Berechnungsverfahren aus Regelwerken etabliert. Innerhalb dieser weitgehend in sich geschlossenen Ingenieursdisziplin nimmt die Methode der finiten Elemente aufgrund ihrer flexiblen Einsatzmöglichkeiten eine zentrale Rolle ein. Als integraler Bestandteil einer CAE-Prozesskette kommt die Finite-Elemente-Analyse durch Aufdeckung konstruktiver Schwachstellen bereits während der Konzeptabwägung einem Werkzeug der Prävention gleich, welches in erheblichem Maß dazu beiträgt, die wirtschaftlichen Anforderungen in Bezug auf eine Verkürzung der Entwicklungszeiten und Senkung der Herstellungskosten zu realisieren. Zu diesem Zweck ist die Weiterentwicklung von numerischen Verfahren zur effizienteren und präziseren Simulation Gegenstand zahlreicher aktiver Forschungsanstrengungen.

Die Arbeit liefert einen Beitrag zur Entwicklung effizienter numerischer Lösungsstrategien im Bereich der Finite-Elemente-Methode. Unter diesem Gesichtspunkt werden in dieser Monographie im Rahmen einer modernen konsistenten Raum- und Zeitdiskretisierung die numerische Simulation thermomechanisch gekoppelter transienter Strukturberechnungen in der Dynamik sowie von Interfacekopplungen, mit Bezug zu geometrisch nichtlinearen unilateralen Kontaktproblemen, unter Einbeziehung von Konstitutivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp umgesetzt. So sind konkret Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung in Gestalt von steif-genauen diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) oder der Generalized- α Methode in Verbindung mit einem Mehrebenen-Newton-Verfahren auf die raumdiskretisierten Gleichungen, die als Resultat der Raumdiskretisierung mit der h-Version der Finite-Elemente-Methode hervorgehen, und auf die in einem gewöhnlichen Differentialgleichungssystem erster Ordnung zusammengefassten Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen, welche das inelastische Materialverhalten adäquat beschreiben, angewendet worden. Mit der Erweiterung des selbst entwickelten numerischen FEM-Berechnungswerkzeugs um eine auf der Mortar-Methode arbeitenden Kontaktformulierung werden die Analysen zum Fehlerverhalten der Zeitintegrationsverfahren auch auf nicht glatte Interfaceprobleme ausgeweitet. Auf Grundlage einer modernen DAE-Interpretation wird die zur Behandlung von Kontaktproblemen in Kombination mit inelastischen Materialverhalten vom Evolutionsgleichungstyp zum Einsatz kommende Lösungsstrategie erstmalig bewusst mit einem halbglattem Multi-

level-Newton-Algorithmus in Verbindung gebracht. Dieser gestattet in einem einzigen Newton-Raphson-Verfahren auf globaler Ebene alle Nichtlinearitäten, resultierend aus der Geometrie, dem Material und der Kontaktinteraktion, aufzulösen.

Um die Genauigkeit und damit die Verlässlichkeit der numerischen Lösung zu kontrollieren sowie zur Reduktion des Berechnungsaufwands kommt eine adaptive Zeitschrittsweitensteuerung zum Einsatz, die quasi keinen numerischen Mehraufwand verursacht.

Anhand eines breiten Spektrums an numerischen Beispielen werden charakteristische Merkmale der entwickelten Lösungsstrategie, wie Effizienz und Präzision, aufgezeigt.

Abstract

An essential task in today's engineering problems is the optimal design and operational dimensioning of technical components. Thus ensuring lightweight construction has become an increasingly important aspect in the overall design process. Highly accurate predictions about the behavior of physical systems are required to warrant the technical integrity of components even with applied loads extremely close to the safety limits. In this context, driven by the rapid development of computer technology, the computer-aided numerical simulations has emerged as a powerful alternative to standardized calculation based methods established from regulations. In the wide yet closed engineering discipline dealing with numerical simulations, finite element methods plays a central role owing to their application flexibility. As an integral part of a Computer Aided Engineering (CAE) process chain, the finite element analysis is utilized to uncover possible weak points in a construction process as early as in the conceptual phase, thus acting as a prevention tool to possible failure of technical components in deployment. Thus Finite Element Methods (FEM) contributes considerably to economic gains and helps to realize optimal production costs by shortening development times and lowering overall production costs. To this end, the advancement of numerical methods for more efficient and precise numerical simulations is subject to many active research efforts.

The present work contributes to the development of powerful numerical solution strategies within the finite element framework. From this viewpoint, the monograph describes a novel consistent spatial and temporal discretization technique for the numerical simulation of thermo-mechanically coupled transient structure calculations in dynamics as well as interface couplings for geometrically non-linear unilateral contact problems comprising of constitutive models of evolutionary type. The implementation of higher-order time-integration methods in the form of rigidly-accurate Diagonal-Implicit Runge-Kutta methods (DIRK) or the generalized- α method in conjunction with a multi-level Newton method on the space-discretized equations resulting from the spatial discretization with the h-version of the finite element method is detailed. This method has been applied to the evolution equations for the inner variables which describe the inelastic material behavior adequately by a first-order ordinary differential equation system. With the extension of the self-developed numerical FEM calculation tool with the Mortar method-based contact formulation, the analysis of the error behavior of the time integration methods is also extended for non-smooth interface problems. Based on a modern Differential Algebraic Equations (DAE) interpretation, the solution strategy used to treat contact problems in combination with inelastic material behavior of the evolutionary type is deliberately coupled with a semi-smooth multilevel Newton algorithm for the first time. This allows the resolution of the non-linearities resulting from geometry, material and contact with a single Newton-Raphson procedure at the global level of a finite element program.

To control the accuracy and thus the reliability of the numerical solution and to reduce

the computational effort, an adaptive time stepping control is utilized with virtually no additional numerical overhead. With the help of a wide range of numerical examples, characteristic features of the developed solution strategy such as efficiency and precision is highlighted.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation der Arbeit	1
1.2	Literaturüberblick	3
1.3	Zielsetzung	12
1.4	Gliederung der Arbeit	13
2	Grundlagen der Kontinuumsmechanik	15
2.1	Kinematik	15
2.1.1	Konfiguration und Bewegung	16
2.1.2	Lagrangesche und Eulersche Betrachtungsweise sowie Zeitableitungen	18
2.1.3	Deformationsgradient und Deformationstensoren	20
2.1.4	Verzerrungstensoren	25
2.1.5	Deformations- und Verzerrungsraten	26
2.2	Kinetische Größen: Spannung und Wärmefluss	28
2.3	Bilanzgleichungen der Thermomechanik	31
2.3.1	Massenbilanz	34
2.3.2	Impulsbilanz	36
2.3.3	Drehimpulsbilanz	37
2.3.4	Energiebilanz – Erster Hauptsatz der Thermodynamik	39
2.3.5	Entropiebilanz – Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	42
2.4	Geometrische Linearisierung	45
2.5	Materialtheorie	48
2.5.1	Beobachterindifferenz und materielle Objektivität	51
2.5.2	Konzept der dualen Variablen	55
2.5.3	Materialmodelle	56
2.5.3.1	Hyperelastizität	60
2.5.3.2	Finite Viskoelastizität	63
2.5.3.3	Finite Viskoplastizität	65
2.5.3.4	Lineare Elastizitätstheorie	69
2.5.3.5	Viskoelastizität	71
2.5.3.6	Thermoelastizität	75
2.5.3.7	Thermoviskoplastizität	77
3	Kontaktmechanik	83
3.1	Problembeschreibung und Kontaktkinematik	83
3.2	Normalkontakt	90
3.3	Tangentialkontakt	92

4	Formulierung von Anfangs-Randwertproblemen	95
4.1	Starke Form von Anfangs-Randwertproblemen	95
4.2	Variationsformulierungen von Anfangs-Randwertproblemen	100
4.2.1	Schwache Form der Impulsbilanz	103
4.2.2	Schwache Form der Wärmeleitungsgleichung	106
4.2.3	Schwache Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems	108
4.3	Starke Form von Anfangs-Randwertproblemen mit Kontakt	111
4.4	Variationsformulierungen von Anfangs-Randwertproblemen mit Kontakt	111
4.4.1	Schwache Form der Impulsbilanz mit Kontakt	111
4.4.2	Schwache Form der Kontaktbedingungen	114
4.4.3	Schwache Form von Anfangs-Randwertproblemen mit Kontakt	115
4.5	Lösungsverfahren für Kontaktprobleme	116
4.5.1	Lagrange-Multiplikator-Methode	120
4.5.2	Penalty Methode	123
4.5.3	Augmented-Lagrange-Methode	126
4.5.4	Perturbed-Lagrange-Methode	129
4.5.5	Nitsche-Methode	132
5	Konsistente Raum- und Zeitdiskretisierung	135
5.1	Raumdiskretisierung mittels der Finite-Elemente-Methode	142
5.2	Zeitdiskretisierung	165
5.2.1	Verfahrensvorschrift für DIRK-Verfahren	169
5.2.2	Applikation der Verfahrensvorschrift für DIRK-Verfahren auf dynamische Prozesse	173
5.2.3	Applikation der Verfahrensvorschrift für DIRK-Verfahren auf quasistatische Prozesse	178
5.2.4	Verfahrensvorschrift Generalized- α Methode	179
5.2.5	Schrittweitenkontrolle	186
5.2.6	Fehlerabschätzung mittels Runge-Kutta Verfahren	195
5.2.7	Fehlerabschätzung mittels Generalized- α Methode	196
5.3	Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mit Multilevel-Newton-Verfahren	197
5.4	Konsistente Linearisierung	204
5.5	Mortar-basierte Finite-Elemente-Methode zur numerischen Behandlung von Kontakt	219
5.5.1	Raumdiskretisierung der virtuellen Kontaktarbeit und variationellen Kontaktbedingungen	225
5.5.2	Auswertung von Mortar-Integralen in 3D	239
5.5.3	Auswertung von Mortar-Integralen in 2D	261
5.5.4	Ansatzfunktionen für die Lagrange-Multiplikatoren	268
5.5.4.1	Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation	269
5.5.4.2	Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation	273
5.5.4.3	Lagrange-Multiplikator Interpolation mit quadratischen Interpolationsansätzen	288

5.5.5	Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie	293
5.5.5.1	Aktive-Mengen-Strategie für Normalkontakt	295
5.5.5.2	Aktive-Mengen-Strategie für Tangentialkontakt	297
5.5.6	Zusammenfassung der semidiskreten Strukturgleichungen	299
5.6	Zeitdiskretisierung der Mortar-Kontaktformulierung	299
5.7	Iterative Lösungsprozedur mittels halbglaten Multilevel-Newton-Algorithmus	307
5.7.1	Konsistente Linearisierung	309
5.7.1.1	Konsistente Linearisierung von \mathbf{G}_u	310
5.7.1.2	Konsistente Linearisierung von \mathbf{C}_N	313
5.7.1.3	Konsistente Linearisierung von $\tilde{\mathbf{C}}_T$	316
5.7.1.4	Matrixformulierung des linearisierten Gleichungssystems	325
5.7.2	Algebraische Repräsentation des linearisierten Gleichungssystems bzgl. einer Standard-Lagrange-Multiplikator- und Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation	326
5.7.3	Kompakte Darstellung des iterativen Lösungsalgorithmus	329
5.8	Globale Kontaktsuche	332
5.9	Skalierungstechnik für segmentbasierte Mortar-Methode	340
6	Numerische Beispiele	349
6.1	Strukturdynamische Berechnungen ohne Kontakt	350
6.1.1	Lineares Einfreiheitsgradsystem	351
6.1.2	Nichtlineares Einfreiheitsgradsystem	361
6.1.3	Elastischer Stab	362
6.1.4	Viskoelastischer Stab	367
6.1.5	Linear-elastische Elastomerprobe	371
6.1.6	Hyperelastische Elastomerprobe	374
6.1.7	Finite viskoelastische Elastomerprobe	377
6.1.8	Vibrierender linear-elastischer Kragträger	381
6.2	Thermomechanisch gekoppelte Berechnungen der Strukturdynamik ohne Kontakt	387
6.2.1	Thermoelastischer Stab	387
6.2.2	Thermoelastische Elastomerprobe	392
6.2.3	Thermoviskoplastische Stahlprobe	396
6.2.4	Thermoviskoplastischer Kragträger	405
6.3	Interfaceberechnungen	413
6.3.1	Viskoelastische Stäbe	413
6.3.2	Zweidimensionaler Kontakt-Patch-Test	421
6.3.3	Dreidimensionaler Kontakt-Patch-Test	424
6.3.4	Hertzsche Pressung	425
6.3.5	Raumkonvergenzstudie - Elastische Balken	432
6.3.6	Dreidimensionaler Eindruckversuch	437
6.3.7	Zeitkonvergenzstudie - Dreidimensionaler Eindruckversuch	440
6.3.8	Zeitkonvergenzstudie - Zweidimensionaler Eindruckversuch	442
6.3.9	Dynamisches Kontaktproblem	451

6.3.10 Umformprozess eines viskoplastischen I-Profiles	455
7 Zusammenfassung und Ausblick	461
A Mathematische Hilfsmittel	467
A.1 Kreuzprodukt in Matrixform	467
A.2 Modulo-Operator	467
A.3 Konditionszahl	467
B FEM-Raumdiskretisierung	471
B.1 Elementformen und Ansatzfunktionen	471
B.2 Numerische Integration	479
B.3 Matrixdarstellung und konsistente Linearisierung	480
B.4 Raumdiskretisierungsfehler	485
B.5 Einheitensystem	500
C Mortar-basierte Finite-Elemente-Methode	503
C.1 Mortar-Segmentierung in 2D	503
C.2 Mortar-Segmentierung in 3D	505
C.3 Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation	511
C.4 Konsistente Linearisierung der Mortar-basierten Finite-Elemente-Methode	528
C.4.1 Konsistente Linearisierung der Normal- und Tangentenvektoren .	528
C.4.2 Konsistente Linearisierung der mortar-basierten Segmentierungs-	
strategie	531
C.4.2.1 Konsistente Linearisierung der mortar-basierten Segmen-	
tierungsstrategie in 3D	531
C.4.2.2 Konsistente Linearisierung der mortar-basierten Segmen-	
tierungsstrategie in 2D	536
C.4.3 Konsistente Linearisierung der Ansatzfunktionen	539
C.4.4 Konsistente Linearisierung der Mortar-Integrale	541
C.4.5 Konsistente Linearisierung der gewichteten Normalklaffung	543
C.4.6 Konsistente Linearisierung der gewichteten tangentialen Relativge-	
schwindigkeit	544
D Zeitdiskretisierung	547
D.1 Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren (DIRK)	547
D.2 Diagonal-implizite Runge-Kutta-Nyström Verfahren (DIRKN)	550
D.3 Newmark-Verfahren	551
D.4 Projektionsmethode	553
E Analytische Lösungen	555
E.1 Analytische Lösung der Wellengleichung	555
E.2 Analytische Lösung der thermomechanisch gekoppelten Wellengleichung .	559
F Numerische Beispiele	565
F.1 Dreidimensionaler Kontakt-Patch-Test	565

F.2 Dreidimensionaler Eindruckversuch	565
G Symbolverzeichnis	569
H Literaturverzeichnis	581
I Liste von Publikationen	623
J Lebenslauf	624

1 Einleitung

1.1 Motivation der Arbeit

Eine wesentliche Aufgabe des Ingenieurs ist die optimale Auslegung und betriebsnahe Dimensionierung von technischen Bauteilen. Neben den klassischen Einschränkungen wie Sicherheit und Langlebigkeit bekommt dabei im Rahmen der Bemessung eines Bauteils der Aspekt Leichtbau eine zunehmende Bedeutung zugesprochen. Damit dennoch bei den geringen Sicherheitsreserven auftretende Lasten risikolos abgeleitet werden können und die Funktionalität der Konstruktion nicht beeinträchtigen, ist die Frage nach der zulässigen Beanspruchung von progressiver Relevanz. Waren es bis in das zweite Drittel des 20. Jahrhunderts noch hauptsächlich standardisierte Berechnungsverfahren aus Regelwerken die zur Auslegung von technischen Bauteilen zum Einsatz kamen, änderte sich dies grundlegend mit der unaufhaltsamen Expansion des Digitalrechners. Getrieben durch die rasante Entwicklung der Computertechnologie hat sich die computergestützte numerische Simulation¹ im Rahmen der Auslegung und Dimensionierung von technischen Strukturen als leistungsfähige Alternative etabliert.

Nach Szabó und Actis [2009] steht am Beginn jeder numerischen Simulation die Konzeptualisierung der physikalischen Realität. Das hiervon abgeleitete mathematische Modell² wird in den meisten Fällen durch einen komplexen Satz von gewöhnlichen bzw. partiellen Differentialgleichungen charakterisiert. Die näherungsweise Lösung der zugehörigen Rand-, Anfangs- oder Anfangs-Randwertaufgabe, welche durchaus erhebliche Nichtlinearitäten in sich vereinen kann, bildet den letzten Schritt der Simulationsprozedur.

Als nahezu universelles numerisches Berechnungswerkzeug nimmt die Finite-Elemente-Methode (FEM) aufgrund ihrer Flexibilität in vielen Anwendungsbereichen eine zentrale Rolle ein. So hat sie sich seit vielen Jahren im Ingenieurwesen bewährt und wird mittlerweile routinemäßig für Berechnungsaufgaben im Maschinen- und Apparatebau, in der Fahrzeugtechnik, in der Luft- und Raumfahrttechnik sowie im Bauwesen herangezogen. Hinsichtlich den ökonomischen Bestrebungen nach einer Verkürzung von Entwicklungszeiten, nach einer Aufwandsreduktion bei Herstellungsprozessen sowie nach Kostenminimierung können auf Basis der FEM-Berechnungsergebnisse frühzeitig Schwachstellen aufgedeckt und notwendige konstruktive Änderungen bereits während der Stadien der Konzeptfindung und Entwicklung vorgenommen werden. Als integraler Bestandteil eines

¹Als Vorhersagewerkzeug lässt sich die computergestützte Simulation dem Gebiet der rechnergestützten Entwicklung bzw. dem in der englischen Fachliteratur bezeichneten Industriesektor „computer-aided engineering“ (CAE), welcher alle Varianten der Rechnerunterstützung von Arbeitsprozessen in der Technik umfasst, zuordnen.

²Das auf Basis von Annahmen erzeugte mathematische Modell kann als eine vereinfachte Abbildung der physikalischen Realität interpretiert werden. Im Rahmen dieser Idealisierungen entstehen Modellierungsfehler.

CAE³ kommt somit die Finite-Elemente-Analyse (FEA)⁴ einem Werkzeug der Prävention gleich, welches in erheblichem Maß dazu beiträgt die Entwicklungszeiten zu verkürzen und die korrelierenden Herstellungskosten zu senken, siehe auch [Klein, 2015].

Die Finite-Elemente-Methode entstand Ende der 1950er Jahre als numerisches Approximationsverfahren zur Berechnung strukturmechanischer Probleme und wurde seitdem kontinuierlich weiterentwickelt. So erwuchs in den letzten drei Dekaden zur Durchführung realitätsnaher Strukturanalysen immer mehr der Wunsch nach einem stetig gesteigerten Grad an Komplexität in der Modellierung. Begünstigt durch erhebliche Leistungssteigerungen in der Rechentechnik⁵ besteht zum einen im Bereich der Strukturmechanik ein immer stärkeres Interesse an einer möglichst realistischen Modellierung der Werkstoffeigenschaften unter realen Betriebsbedingungen. Ein entsprechendes Grundgerüst zur Beschreibung der in Experimenten beobachteten Materialeigenschaften stellt die Kontinuumsmechanik bereit. Im Sinne einer phänomenologisch geprägten Feldtheorie ermöglicht sie, thermodynamisch konsistente Materialmodelle als funktionale Beziehungen zwischen Deformations-, Spannungs-, und Temperaturprozessen aufzustellen. Dies impliziert, dass neben dem die Deformation der Struktur beschreibenden Verschiebungsfeld weitere Feldvariablen, wie die Temperatur, sowie deren Wechselwirkungen berücksichtigt werden müssen.⁶ Aber auch solche Anwendungsgebiete, d. h. die Behandlung anderer Feld- oder gekoppelter Mehrfeldprobleme, konnte die Finite-Elemente-Methode für sich erschließen, sodass die Simulation hochgradig nichtlinearer, gekoppelter und transienter Prozesse keine Zukunftsvision mehr ist.

Die meisten physikalischen Bewegungsvorgänge werden durch die Interaktion verschiedener, miteinander in Berührung kommender Strukturen begleitet. Wurde früher versucht derartige mechanische Interfaceeffekte an den Grenzflächen über entsprechende Last- und Randbedingungsannahmen in die Modellierung einfließen zu lassen, entspricht dies schon längst nicht mehr dem aktuellen Stand der Technik. An ihre Stelle tritt eine auf Prinzipien der Kontaktmechanik motivierte Umsetzung. So kann beispielsweise im Rahmen einer Kontaktinteraktion die Beschränkung der Nichtdurchdringung zweier kontaktierender Körper als die wichtigste Gesetzmäßigkeit einer erweiterten makroskopischen Kontinuumstheorie identifiziert werden. Die hierzu in enger Beziehung stehenden Effekte,

³Heutzutage ist die Durchführung von FEM-Simulationen als integraler Bestandteil einer durchgängigen CAE-Prozesskette zu interpretieren. Neben konstruktionsbegleitende FE-Analysen (FEA) werden das rechnerunterstützte Konstruieren („computer-aided design“, CAD), Optimierung (z. B. Materialparameter- oder Topologieoptimierung) und Lebensdauervorhersagen in einem einzelnen Prozessstrang zusammengeführt.

⁴Die vom englischen Ausdruck „finite element analysis“ abgeleitete Bezeichnung Finite-Elemente-Analyse (FEA) kennzeichnet eine rechnergestützte Nachweisrechnung auf Basis der Methode der finiten Elemente.

⁵Mit der ökonomisch realisierbaren Anschaffung von in der Performance gesteigerten Hochleistungsrechnern konnten bis dato geltende Limitierungen in der Modellierung einfach ausgehebelt werden. Zu den hervorzuhebenden Maßnahmen, die zu einer Leistungssteigerung geführt haben, zählt u. a. die Entwicklung von zentralen Recheneinheiten (CPUs) mit immer höheren Taktfrequenzen. Nachdem allerdings, aufgrund der mit der elektrischen Verlustleistung korrelierenden Wärmeabfuhr, eine weitere Erhöhung der Taktfrequenzen nicht sinnvoll zu realisieren war, fand die Einführung von auf parallele Verarbeitung ausgerichteten Architekturen, wie z. B. von Mehrkernprozessoren, statt.

⁶Probleme, die von mehr als einer Feldvariable oder von mehr als einer Bilanzaussage kontrolliert werden, tragen die Bezeichnung Mehrfeldprobleme.

wie z. B. Haft- und Gleitreibung, Adhäsion, Verschleiß und Schmierung, beschreiben weitere in der Berührungszone auftretende Wechselwirkungen. Zusammengenommen führen Kontakt und die einhergehenden Interfacephänomene starke Nichtlinearitäten in die mathematische Problembeschreibung ein, sodass sich nur sehr wenige Sonderfälle von Kontaktproblemen einer analytischen Behandlung zuführen lassen. Nach Konzentration der zuvor aufgeführten exemplarischen Argumente wird deutlich, dass eine stetig steigende Nachfrage nach leistungsfähigen numerischen Simulations- und Berechnungsverfahren im Bereich der Kontaktmechanik besteht. In der aus dieser Resonanz erschlossenen Forschungsdisziplin, der numerischen Kontaktmechanik, hat sich ebenfalls zur Bedienung eines breiten Spektrums von wissenschaftlichen und technischen Interessen die Finite-Elemente-Methode als Standardverfahren etabliert.

Die hier vorliegende Arbeit versteht sich als ein Ausschnitt zur Entwicklung robuster und effizienter numerischer Lösungsstrategien. Mit Bezug zu transienten thermomechanisch gekoppelten Feldproblemen und der Simulation von mechanischen Kontaktvorgängen wird im Rahmen der nichtlinearen Finite-Elemente-Methode ein Konzept erarbeitet, um mit Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung hochgenaue numerische Lösungen im Zeitbereich zu erzielen. Dabei sollen auch Aussagen über die Genauigkeit der erhaltenen Näherungslösungen getroffen werden.

1.2 Literaturüberblick

Während der letzten Dekaden hat sich die Finite-Elemente-Methode als universell einsetzbares Berechnungswerkzeug zur Analyse von komplexen Strukturen und Prozessen im Ingenieurwesen bewährt. Die allgemeine Fachliteratur zur Methode der finiten Elemente ist abundant. Stellvertretend finden daher für lineare Problemstellungen nur die Aufsätze von Becker et al. [1981], Schwarz [1984], Szabó und Babuška [1991], Hughes [2000], Bathe [2002], Betten [2003], Oñate [2013] und Zienkiewicz et al. [2013] Erwähnung. Nichtlineare Fragestellungen werden beispielsweise in den Monographien von Strang und Fix [1973], Carey und Oden [1983], Belytschko et al. [2000], Ciarlet [2002], Betten [2004], Oden [2006], Bonet und Wood [2008], Wriggers [2008], Szabó und Babuška [2011], Borst et al. [2012], Dhatt et al. [2012], Zienkiewicz et al. [2014], Rust [2016] und Knothe und Wessels [2017] behandelt. Seit Bestehen der konformen Finite-Elemente-Methode hat sie sich in diverse unterschiedliche Entwicklungsrichtungen aufgespalten. So beschränkt sich das klassische Raumdiskretisierungskonzept zur Interpolation der Feldgrößen im Element auf lineare oder quadratische Ansatzfunktionen. Die oft benutzte Klassifizierung als h-Version der Methode der finiten Elemente (h-FEM) drückt aus, dass durch Netzverfeinerung, also Verringerung der Elementabmessungen, eine Annäherung an die exakte Lösung des betrachteten Problems sowie die Approximation an eine fehlerfreie Beschreibung von gekrümmten Geometrien sichergestellt ist.⁷ Der Polynomgrad der elementweise definierten

⁷Durch Netzverfeinerung wird der endlichdimensionale Lösungsraum, aus dem die numerische Näherungslösung stammt, erweitert und eine bessere Approximation erzeugt. Streben die Abmessungen der endlich vielen Teilgebiete (finite Elemente) gegen Null, konvergiert die Finite-Elemente-Methode hinsichtlich theoretischer Überlegungen gegen die exakte Lösung. Wie in der einschlägigen Fachliteratur nachzulesen ist, geschieht die Annäherung idealerweise mit einer algebraischen Raumkonvergenzrate.

Ansatzfunktionen bleibt dabei unangetastet. Noch heute zählt die h-Version der Methode der finiten Elemente aufgrund ihrer Flexibilität bei gleichzeitig hoher Robustheit zu der am weitesten verbreiteten Variante. Die Limitierung des Polynomgrades wurde durch die sogenannte p-Version der Finite-Elemente-Methode (p-FEM) aufgehoben. Im Rahmen des p-FEM-Konzepts wird zur Verbesserung der Lösungsgenauigkeit der Polynomgrad für die Elementansatzfunktionen, wobei dies mit einer Erhöhung der Anzahl von Freiheitsgraden einhergeht, heraufgesetzt. Die mit einer konstanten, zumeist sehr kleinen Anzahl an finiter Elemente diskretisierte Geometrie bleibt unverändert. Um hohe Polynomgrade mit spezifischen Eigenschaften zu realisieren, hat es sich als zweckmäßig erwiesen, hierarchische Formfunktionen auf Basis von integrierten Legendre-Polynomen zu verwenden. Wie exemplarisch Szabó et al. [2004] zeigen, weist die p-Version der Finite-Elemente-Methode bei exakter Geometrieapproximation eine exponentielle Konvergenzrate hinsichtlich des Raumdiskretisierungsfehlers auf. Falls eine unzureichende Geometriewiedergabe vorliegt, können die verbesserten Genauigkeits- und Konvergenzeigenschaften nicht nutzbringend verwertet werden. Aus diesem Grund wird die p-Version der Finite-Elemente-Methode oft mit Maßnahmen für eine verbesserte oder sogar exakte Geometrieapproximation kombiniert. So erlaubt beispielsweise der Einsatz der im englischen Sprachgebrauch bezeichneten „blending function method“ beliebig geformte Regionen einer Struktur unter Einbeziehung von CAD-Flächeninformationen ohne Geometriefehler zu diskretisieren, siehe auch [Netz, 2013]. Der Ursprung der p-Version der Finite-Elemente-Methode geht zurück auf die Arbeiten von Peano [1976] und Szabó [1979]. Seitdem wurden intensive Forschungsanstrengungen unternommen. Für eine kleine Auswahl von Aufsätzen und Monographien zu diesem Themenkomplex sei in chronologischer Reihenfolge daher lediglich auf die Arbeiten von Babuška et al. [1981], Babuška und Szabó [1982], Szabó et al. [1989], Szabó und Babuška [1991], Suri [1996], Actis et al. [1999], Babuška und Strouboulis [2001], Düster [2001], Düster et al. [2001], Düster und Rank [2001], Düster und Rank [2002], Düster et al. [2002], Düster et al. [2003], Szabó et al. [2004], Rank et al. [2005], Düster et al. [2007], Heisserer et al. [2007], Yosibash et al. [2007], Heisserer et al. [2008], Netz et al. [2011], Hartmann und Netz [2013], Netz [2013], Al-Kinani et al. [2015] und Netz und Hartmann [2015] hingewiesen. Werden der h-FEM- und p-FEM-Ansatz miteinander kombiniert, ist von der hp-Version der Finite-Elemente-Methode die Rede. Eine in jüngster Vergangenheit in der Pionierarbeit von Hughes et al. [2005] vorgestellte geometrieorientierte Raumdiskretisierungsstrategie, die sogenannte isogeometrische Analysis, verknüpft die isoparametrische Finite-Elemente-Methode mit NURBS-basierten⁸ CAD-Methoden und vereint damit Vorteile aus dem h-FEM- und p-FEM-Ansatz. Durch direkte Übertragung der NURBS-basierten Oberflächenbeschreibungen der Struktur aus dem CAD-Programm wird eine fehlerfreie Abbildung der Geometrie sichergestellt. Gleichzeitig ermöglicht die Interpretation der aus dem CAD-Programm übernommenen B-Spline-Funktionen als spezielle Klasse von hierarchischen Ansatzfunktionen eine Interpolation der primären Feldvariablen. Des Weiteren drückt sich die besondere Eignung der NURBS-Funktionen, welche die den Stand der Technik repräsentierende CAD-Technologie darstellen, in dem Verfahrensmerkmal aus, dass auf einfache Art und Weise Verfeinerungen in der Vernet-

⁸Das Akronym NURBS bezeichnet in der englischsprachigen Literatur „Non-Uniform Rational B-Splines“.

zung und im Polynomgrad der NURBS-Funktionen vorgenommen werden können, ohne die zugrunde liegende Geometrie zu verändern. Maßgeblichen Anteil an der Entwicklung der isogeometrischen Analysis hatten unter anderem die Arbeiten von Hughes et al. [2005], Cottrell et al. [2009], Hughes et al. [2010], Bazilevs et al. [2010], Taylor [2011], Borden et al. [2011], Scott et al. [2011], Auricchio et al. [2012a], Auricchio et al. [2012b] und Nguyen et al. [2015].

In [Wittekindt, 1991; Fritzen, 1997; Ellsiepen, 1999; Ellsiepen und Hartmann, 2001] wird der allgemeine nichtlineare Finite-Elemente-Ansatz zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen (PDEs), welcher physikalische Nichtlinearitäten in Gestalt von Konstitutivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp (Theorie der inneren Variablen), wie z. B. der Viskoelastizität, der Viskoplastizität oder der Elastoplastizität, berücksichtigt, als eine Anwendung der vertikalen Linienmethode, siehe [Schiesser, 1991; Großmann und Roos, 1994], interpretiert. Dabei nimmt die zur Lösung des zugrunde liegenden zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungssystems eingesetzte vertikale Linienmethode eine Trennung von räumlicher und zeitlicher Diskretisierung der zugeordneten Variationsformulierung vor. Die Ortsdiskretisierung unter Verwendung der Methode der finiten Elemente führt auf Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODE-Systeme) bzw. Differential-Algebraischen Gleichungssystemen (DAE-Systeme), welche weiterhin kontinuierlich von der Zeit abhängen. Beispielsweise resultieren mit Bezug zur nichtlinearen Strukturmechanik aus der räumlichen Parametrisierung die semidiskreten Bewegungsgleichungen in Abhängigkeit der unbekannten Knotenverschiebungen und den sogenannten inneren Variablen. Letztere sind als Prozessvariablen des Konstitutivmodells durch Evolutionsgleichungen, d. h. gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung, an allen räumlichen Integrationspunkten der Struktur definiert. Im Rahmen isothermer Betrachtungen zur quasistatischen Strukturmechanik demonstrieren Ellsiepen und Hartmann [2001] die Gleichwertigkeit zwischen der Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens (BE) auf das aus der Raumdiskretisierung hervorgehende DAE-System in Kombination mit dem Multilevel-Newton-Verfahren (MLNA) zur Lösung des resultierenden nichtlinearen Gleichungssystems und der klassischen Finite-Elemente-Philosophie, d. h. der direkten Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens auf Quadraturebene kombiniert mit der von Simo und Taylor [1985] geprägten Vorgehensweise zur konsistenten Linearisierung. Es ist hervorzuheben, dass das Applizieren des reinen Newton-Raphson-Verfahrens in der vielfach zitierten Pionierarbeit von Simo und Taylor [1985] nicht auf die häufig propagierte iterative Lösung auf Gauß-Punktebene, den sogenannten Spannungsalgorithmus, führt, siehe hierzu auch [Hartmann, 2004; Hartmann, 2005]. Erst nach genauerer Betrachtung des Originalartikels wird ersichtlich, dass der Satz über implizite Funktionen Anwendung findet. Das eigentlich ausgenutzte numerische Verfahren zur Lösung des in Abhängigkeit der inneren Variablen und der Verschiebungsfreiheitsgrade ausgedrückten gekoppelten nichtlinearen Gleichungssystems stellt das sogenannte Multilevel-Newton-Verfahren (MLNA) dar, siehe [Rabbat et al., 1979; Hoyer und Schmidt, 1984; Schmidt et al., 1985]. Auf Basis dieser in [Wittekindt, 1991; Fritzen, 1997; Ellsiepen, 1999; Ellsiepen und Hartmann, 2001] gezogenen Schlussfolgerungen konnte die klassische Vorgehensweise im Bereich der nichtlinearen Finite-Elemente-Methode erstmals mit konkreten Verfahren der numerischen Mathematik in Verbindung gebracht werden. Mit den Einblicken, die diese globale ODE- bzw. DAE-Interpretation eröffnet, wird die Grundlage geschaf-

fen, effizientere numerische Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung, siehe hierzu die Monographien von Hairer et al. [1993], Hairer und Wanner [1996], Hairer et al. [2006] und Strehmel et al. [2012], auf die zu behandelnden semidiskreten Strukturgleichungen anzuwenden und damit neue Finite-Elemente-Schemata zu entwickeln.

Eine wesentliche Klasse von hochgenauen Integrationsverfahren zum Voranschreiten im Zeitbereich bilden die sogenannten Mehrschrittverfahren, welche Informationen von mehreren zurückliegenden Zeitschritten ausnutzen, siehe [Hairer und Wanner, 1996]. Da zum Anfangszeitpunkt der Simulation noch keine Startwerte von weiter vorausgegangenen Zeitinkrementen vorliegen, ist eine gesonderte Initialisierungsprozedur zu durchlaufen. Im Zusammenhang mit den oben erörterten inelastischen Systemen sei für Untersuchungen zum Verhalten von Mehrschrittmethoden auf die Arbeiten von Scherf [2000] und Eckert et al. [2004] verwiesen.

Weitaus häufiger sind allerdings Einschrittintegratoren anzutreffen, die zum Voranschreiten im Zeitbereich lediglich auf die zuletzt berechnete Näherung zurückgreifen. Die bedeutendste Klasse der Einschrittverfahren zur numerischen Integration von nichtlinearen steifen Differentialgleichungen und Differential-Algebraischen Gleichungssystemen bilden implizite Runge-Kutta Verfahren (RK). Um eine effiziente Verfahrensvorschrift zu erhalten, liegt der Fokus der Betrachtung zumeist auf den sogenannten diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK), siehe [Alexander, 1977; Cash, 1979]. Im Rahmen von quasistatischen Problemstellungen der Strukturmechanik wurden in den Aufsätzen von Hartmann [1999], Hartmann [2001a], Ellsiepen und Hartmann [2001], Hartmann [2000], Hartmann [2002], Hartmann [2003], Hartmann [2005], Hartmann [2006b], Hartmann und Bier [2007], Quint und Hartmann [2007], Quint et al. [2008], Hartmann et al. [2008a], Hartmann und Bier [2008], Hartmann et al. [2008b], Hartmann et al. [2009a], Rothe et al. [2011], Rothe et al. [2012], Krämer et al. [2013], Sguazzo et al. [2014] und Grafenhorst et al. [2014] DIRK-Verfahren untersucht, deren Charakteristika sich in überzeugenden Resultaten hinsichtlich Effizienz, Robustheit und Genauigkeit manifestieren. Die Erweiterung des monolithischen DIRK/MLNA-Ansatzes auf gekoppelte Mehrfeldprobleme wurde in [Hartmann et al., 2009b; Quint, 2012; Hartmann et al., 2013; Al-Kinani, 2014; Rothe et al., 2015b; Rothe et al., 2015a; Rothe, 2015] umgesetzt. Thermisch motivierte Transportvorgänge, deren Lösungscharakter sich grundlegend von mechanischen Systemen unterscheidet, sind Gegenstand der Untersuchungen in [Quint et al., 2011; Carstens und Kuhl, 2012]. Die letztere Autorengruppe zieht dabei im Rahmen hochgenauer Diskretisierungen im Raum zusätzliche Vergleiche zu anderen Zeitintegrationsklassen. Eine vollständig iterationsfreie Lösungsprozedur innerhalb des Finite-Elemente-Kontextes wurde in den Arbeiten von Hartmann und Wensch [2007], Hamkar und Hartmann [2008], Hartmann und Hamkar [2010], Netz et al. [2011], Hamkar et al. [2012], Hamkar und Hartmann [2012] und Hamkar [2013] durch die Anwendung von linear-impliziten Runge-Kutta Verfahren (LIRK), mit Fokus auf die sogenannten Rosenbrock-Verfahren der LIRK-Klasse, realisiert. Der Vorteil, dass keine nichtlinearen Gleichungssysteme, weder global noch lokal auf Quadraturebene, resultieren, sondern nur lineare Gleichungssysteme behandelt werden müssen, führt zu einer beachtenswerten Reduktion des Rechenaufwands. Die Adaptierung der DIRK-Verfahren für die Strukturmechanik erfolgt in den Arbeiten von Owren und Simonsen [1995], Grafenhorst et al. [2016] und Grafenhorst et al. [2017], wobei die zwei zuletzt benannten Aufsätze im Rahmen des DIRK/MLNA-

Konzepts den Fokus auf inelastische Problemstellungen mit inneren Variablen legen. Zur Applikation der Runge-Kutta Verfahren auf strukturdynamische Probleme muss die semidiskrete Bewegungsgleichung in ein äquivalentes ODE-System erster Ordnung transformiert werden. Unter Bezug auf diesen Zusammenhang ist daher von indirekten Integratoren die Rede. Traditionell kommen allerdings im Bereich der Elastodynamik zur Zeitdiskretisierung der semidiskreten Bewegungsgleichung direkte Integratoren, wie z. B. die Newmark- β Methode (s. [Newmark, 1959]), die HHT- α -Methode (s. [Hilber et al., 1977]), die WBZ- α -Methode (s. [Wood et al., 1980]) oder die Generalized- α Methode (Gen- α , s. [Chung und Hulbert, 1993]) zum Einsatz. Analysen und exemplarische Anwendungen zu diesen numerisch dissipativen Algorithmen finden sich in einer kaum aufzählbaren Anzahl von Aufsätzen. Aus diesem Grund seien stellvertretend nur die Arbeiten von Newmark [1959], Bathe und Wilson [1972], Goudreau und Taylor [1973], Belytschko und Schoeberle [1975], Hilber et al. [1977], Hilber und Hughes [1978], Wood et al. [1980], Adams und Wood [1983], Hughes [1983], Chung und Hulbert [1993], Bauchau et al. [1995], Kuhl [1996], Hughes [2000] und Erlicher et al. [2002] erwähnt. Lunk und Simeon [2006], Negrut und Laurent [2007] und Arnold und Bröls [2007] gelingt es, eine Reaktionskraftberechnung mittels der Lagrange-Multiplikator-Methode, siehe auch [Hartmann et al., 2008b], in die Verfahrensvorschrift der Generalized- α Methode bzw. hiervon abgeleitete Derivate ohne Verlust der temporalen Genauigkeitsordnung einzubetten. Im Rahmen thermomechanisch gekoppelter Problemstellungen der Strukturdynamik, wobei die thermomechanische Kopplung durch ein thermoviskoplastisches Konstitutivmodell induziert wird, zeigen [Grafenhorst et al., 2017] die Anwendbarkeit der Generalized- α Methode auf solche Systeme. Während zur zeitlichen Parametrisierung der semidiskreten Bewegungsgleichung das klassische Verfahren nach Chung und Hulbert [1993] herangezogen wird, erfolgt die Zeitdiskretisierung der semidiskreten Wärmeleitungsgleichung und der Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen mit einer für ODE-Systeme erster Ordnung entworfenen Einschnittvariante der Generalized- α Methode, siehe [Jansen et al., 2000; Dettmer und Perić, 2003; Rang, 2013a; Rang, 2013b].

Soll eine transiente Simulation im Bereich der Dynamik zuverlässige Ergebnisse liefern, sollte der verwendete Integrator das von Belytschko und Schoeberle [1975] vorgeschlagene Kriterium der energetischen Stabilität erfüllen. Dieses sagt aus, dass ohne das Einwirken von äußeren Lasten die mechanische Energie des Gesamtsystems konstant bleiben oder abnehmen muss. Bis auf wenige Ausnahmen bzw. Parametrisierungen der Integratoren zieht der Großteil der zuvor genannten Zeitintegrationsverfahren sukzessive Energie aus dem System. In Bezug auf die Berechnung von langzeitdynamischen Prozessen können damit zumeist nur unbefriedigende Resultate erzielt werden. Dieses Defizit greifen exemplarisch die Arbeiten um [Simo und Wong, 1991; Simo und Tarnow, 1992; Simo et al., 1992; Tarnow, 1993; Lewis und Simo, 1994; Kuhl und Crisfield, 1999; Kuhl und Ramm, 1999; Kuhl und Ramm, 2000; Gonzalez, 2000; Betsch und Steinmann, 2001; Groß, 2004; Groß und Betsch, 2011] auf, in denen die Entwicklung von sogenannten energie- und impulserhaltenden Integrationsverfahren vorangetrieben wird. Während viele Integrationsverfahren die Konservierung der relevanten Größen wie Energie, Impuls und Drehimpuls für ein konservatives System nicht garantieren, findet bei den energie- und impulserhaltenden Schemata eine Berücksichtigung der algorithmischen Konservierung dieser Systeminvarianten bereits bei der Konstruktion statt. Als einer der populärsten

Vertreter dieser Klasse sei die „energy-momentum-method“ (EMM) von Simo und Tarnow [1992] genannt, welche neben der Erhaltung der Energie auch die Erhaltung der Impulssabbildungen innerhalb eines Zeitschritts garantiert. Die EMM-Methode, die aus einer einfachen Modifikation der impliziten Mittelpunktsregel, siehe z. B. [Ortiz und Popov, 1985; Simo und Wong, 1991; Ellsiepen und Hartmann, 2001], hervorgeht, wurde in [Simo und Tarnow, 1994; Crisfield und Shi, 1994; Simo et al., 1995; Crisfield und Shi, 1996; Galvanetto und Crisfield, 1996; Crisfield et al., 1997; Armero und Petőcz, 1996; Gonzalez, 1996; Armero und Petőcz, 1998; Armero und Petőcz, 1999; Gonzalez, 2000; Miehe und Schröder, 2001] angewendet bzw. weiterentwickelt und in [Kuhl und Crisfield, 1999; Kuhl und Ramm, 1999; Kuhl und Ramm, 2000] auf Basis der Generalized- α Methode zur „generalized energy-momentum method“ (GEMM) mit der Möglichkeit einer zusätzlich einstellbaren numerischen Dissipation erweitert. Hierauf aufbauend wurde von Romero [2009], Romero [2010a] und Romero [2010b] ein allgemeines Konzept zur Konstruktion von sogenannten thermodynamisch konsistenten Zeitintegrationsverfahren, die bereits beim Entwurf des Integrators die diskretisierten thermodynamischen Bilanzaussagen sowie weitere zugrunde liegende Symmetrien automatisch erfüllen, vorgestellt. Das Grundgerüst für diese Verallgemeinerung bildete die von Grmela und Öttinger [1997], Öttinger und Grmela [1997] und Öttinger [2005] eingeführte **GENERIC**-Formulierung, die kontinuumsmechanisch motivierte Entwicklungsgleichungen eines thermodynamischen Systems in reversible und irreversible Anteile aufspaltet, siehe auch [Mielke, 2011]. Das Resultat der Kombination aus zeitdiskretisierter **GENERIC**-Gleichungsstruktur vom Mittelpunktstyp und einem speziellen diskreten Ableitungsoperator, siehe hierzu z. B. [Gonzalez, 1996; Gonzalez, 2000; Conde Martín, 2016], sind kanonisch strukturerhaltende Zeitintegrationsverfahren zweiter Ordnung. Analysen und exemplarische Anwendungen für diese Integratorklasse werden in den Aufsätzen von Groß und Betsch [2009], Romero [2009], Romero [2010a], Romero [2010b], Krüger et al. [2011], Groß und Betsch [2011], Krüger [2012], Gonzalez-Ferreiro et al. [2014], Conde Martín et al. [2016], Conde Martín [2016] und Krüger et al. [2016] diskutiert.

Erste Beiträge zur Behandlung von Kontaktproblemen im Rahmen der Methode der finiten Elemente gehen zurück auf Francavilla und Zienkiewicz [1975] und Hughes et al. [1976]. Die in diesen Veröffentlichungen sowie in den Arbeiten von Wriggers und Zavarise [1993] vorgestellten, knoten-basierten Ansätze, welche auch als **NTN**-Diskretisierung („node-to-node“ - NTN) bezeichnet werden, unterliegen in Bezug auf die Oberflächendiskretisierung der Kontaktschnittstelle der Restriktion von paarweise gegenüberliegenden Knoten. Um diesen Zustand aufrecht zu erhalten, stellt die Annahme kleiner Deformationen eine notwendigerweise zusätzlich auferlegte Prämisse dar. Da die Kontaktbedingungen an einzelnen Punkten der kontaktierenden Oberflächen erzwungen werden, zählt die NTN-Kontaktdiskretisierung zu den sogenannten Kollokationsformulierungen. Zur Simulation geometrisch nichtlinearer Kontaktprobleme in Verbindung mit nicht konformen Oberflächenvernetzungen etablierte sich in vielen kommerziellen Berechnungsprogrammen der sogenannte **NTS**-Algorithmus („node-to-segment“ - NTS) als Standardprozedur auf dem Gebiet der numerischen Kontaktmechanik. Damit konnten beispielsweise erstmals auch Problemstellungen mit großen Gleitbewegungen untersucht werden. Im Rahmen des NTS-Algorithmus werden jeweils die Kopplungsbedingungen, u. a. die geometrische Nichtdurchdringungsbedingung, punktuell zwischen einem Knoten auf der Oberfläche des

ersten Körpers (Slave-Seite) und einem sich auf der gegenüberliegenden Kontaktfläche (Master-Seite) befindenden Projektionspunkt erzwungen. Die ersten Formulierungen der NTS-Kontaktdiskretisierungstechnik finden sich beispielsweise in [Hughes et al., 1977; Hallquist, 1979]. Hierauf aufbauend wurden viele Erweiterungen u. a. von Hallquist et al. [1985], Bathe und Chaudhary [1985], Wriggers und Simo [1985], Benson und Hallquist [1990], Laursen [1992], Simo und Laursen [1992], Laursen und Simo [1993a], Wriggers et al. [1990], Zavarise und De Lorenzis [2009a], Zavarise und De Lorenzis [2011] und Martins et al. [2017] vorgeschlagen. Exemplarische Anwendungen der NTS-Diskretisierungs- methode finden sich u. a. auch in [Zavarise et al., 1992; Wriggers, 1996; Zavarise et al., 1998; Laursen, 2003; Bandeira et al., 2004; Erhart et al., 2006; Wriggers, 2006; Khoei et al., 2009; Zavarise und De Lorenzis, 2009b; Hesch und Betsch, 2011b; Weißenfels, 2013; Franke, 2014]. Obwohl mit dem Einsatz des sehr robusten „Knoten-zu-Segment“- Ansatzes zahlreiche Kontaktprobleme gelöst werden konnten, bringt die Verwendung dieser recht einfachen Kollokationsformulierung auch einige Probleme mit sich. Ein solches Defizit stellt die sprunghafte (diskontinuierliche) Veränderung der Interfacekräfte bei großen tangentialen Gleitbewegungen dar. Diese numerische Instabilität resultiert primär aus der facettierten Oberflächenbeschreibung der Kontaktflächen, bei denen Knicke zwischen benachbarten Oberflächenelementen auftreten. Zur Vermeidung dieser Problematik wurden beispielsweise von Taylor und Wriggers [1999], Padmanabhan und Laursen [2001], Wriggers et al. [2001], Krstulovic-Opara et al. [2002], Stadler et al. [2003], Puso und Laursen [2002], Puso [2004] und Neto et al. [2017] Ansätze auf Basis diverser Interpolationsmethoden, wie z. B. Hermite-, Bézier-, Spline- und NURBS-Interpolationen, für eine geglättete Oberflächenbeschreibung vorgeschlagen. Einen umfassenden Überblick zu den Glättungsalgorithmen gibt [Wriggers, 2006]. Wie außerdem Taylor und Papadopoulos [1991], Crisfield [2000] und El-Abbasi und Bathe [2001] zeigen, erfüllt der klassische „Knoten-zu-Segment“-Ansatz bei inkompatiblen Oberflächenvernetzungen nicht den häufig zur Verifikation einer Kontaktformulierung herangezogenen konservativen Kontakt-Patch-Test. Aufgrund der für den „Knoten-zu-Segment“-Ansatz angeführten Nachteile einer Kollokationsformulierung begann schon früh die Entwicklung von „Segment-zu-Segment“-Strategien („segment-to-segment“ - **STS**), welche die Kontaktbedingungen nicht an ausgewählten Punkten, sondern in einer integralen Art und Weise erfüllen. Die erste Realisierung solch eines Algorithmus wurde von Simo et al. [1985b] vorgestellt. Im Kontrast zur vorherigen NTS-Kontaktdiskretisierungsstrategie stützt sich die „Segment-zu-Segment“-Kontaktdiskretisierung auf eine systematische Unterteilung der Kontaktoberflächen in individuelle Segmente, die den Überlappungsregionen gegenüberliegender Elemente entsprechen. In Kombination mit bereichsweise definierten konstanten Ansätzen für den Kontaktdruck erlaubt diese aufwendigere Strategie die integral formulierte Nichtdurchdringungsbedingung segmentweise entlang einer virtuellen Zwischenschicht, ohne Unstetigkeiten in den Integranden auszuwerten. Da der hieraus berechnete Wert für die Abstandsfunktion mehr Informationen als ein äquivalenter, mittels des NTS-Algorithmus, berechneter Klaffungswert einbezieht, erfolgt die Erzwingung der Übergangsbedingungen kontinuierlicher. Darüber hinaus sind mit Bezug zu Weiterentwicklungen des STS-Ansatzes, der sich u. a. durch Stabilität, Bestehen des Kontakt-Patch-Tests sowie Erhalten der optimalen, räumlichen Konvergenzrate in der Verzerrungsenergie bei Netzverfeinerung auszeichnet, die Arbeiten von Papadopoulos

und Taylor [1992], Papadopoulos und Taylor [1993], Zavarise und Wriggers [1998] und El-Abbasi und Bathe [2001] zu nennen.

Die zuletzt genannten Eigenschaften der STS-Algorithmen stellen plausible, einzuhaltende Anforderungen einer jeden Kontaktdiskretisierungstechnik dar. Aus diesem Grund wurden in den 1990er Jahren Bestrebungen unternommen Interfacediskretisierungstechniken auf einer mathematisch fundierteren Basis zu entwickeln. Hieraus ging die Mortar-Methode hervor. Kennzeichnend für die Mortar-Methode ist eine variationell konsistent formulierte Oberflächenkopplung. Damit wird sichergestellt, dass die Eindeutigkeit der Lösung erhalten bleibt und bei Netzverfeinerung optimale räumlichen Konvergenzraten erzielt werden. Einzug in die wissenschaftlichen Diskussionen hat die Mortar-Methode ursprünglich als nicht-konforme Gebietszerlegungstechnik durch [Bernardi et al., 1993; Bernardi et al., 1994] erhalten. Mit Bezug zur numerischen Kontaktmechanik finden sich im Rahmen einer kinematisch linearen Betrachtung erste ingenieursnahe Realisierungen der Mortar-Methode in [McDevitt und Laursen, 2000]. Die Erweiterung auf geometrisch nichtlineare Kontaktinteraktionen mit und ohne reibungsbehaftete Gleitbewegungen wird beispielsweise in [Cavaleri und Cardona, 2013a; Cavaleri und Cardona, 2013b], [Cichosz und Bischoff, 2011; Cichosz, 2012], [Farah et al., 2015; Farah et al., 2017], [Fischer und Wriggers, 2005; Fischer und Wriggers, 2006], [Franke, 2014], [Gitterle et al., 2010; Gitterle, 2012], [Hammer, 2012; Hammer, 2013], [Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann und Ramm, 2008], [Hesch und Betsch, 2009; Hesch und Betsch, 2011c], [Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Popp, 2012; Popp et al., 2012; Popp et al., 2013; Popp und Wall, 2014], [Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b], [Wilking und Bischoff, 2017], [Tur et al., 2009; Tur et al., 2012], [Yang et al., 2005; Yang und Laursen, 2007; Yang und Laursen, 2008], [Temizer, 2012; Temizer et al., 2012; Temizer, 2013] und [Weißenfels, 2012; Weißenfels und Wriggers, 2015] behandelt.

Zur variationell konsistenten Behandlung der reibungsbehafteten Gleit- und Nichtdurchdringungsbedingungen haben sich seit dem Aufkommen der Mortar-Methode diverse mortar-basierte Kontaktformulierungen entwickelt. So wurden in den Anfangsjahren die Interface-Kopplungsbedingungen zunächst noch direkt in die Lösungsräume der Primärvariablen (des Verschiebungsfeldes) integriert, sodass die Nebenbedingungen entlang des Kopplungsrandes a priori im integralen Sinne erfüllt sind, siehe hierzu die Arbeiten von Bernardi et al. [1993], Bernardi et al. [1994], Belgacem et al. [1998] und Bernardi et al. [2005]. Hierauf folgend etablierten sich alternative Formulierungen, die anstatt Restriktionen an die Lösungsräume zur Umsetzung der schwach formulierten Kontaktbedingungen zu stellen, bekannte Methoden aus der Optimierungstheorie, wie z. B. die Lagrange-Multiplikator-, die Penalty- oder die Augmented-Lagrange-Methode, verwendeten. Aus der Verzweigung der unterschiedlichen Entwicklungsrichtungen innerhalb der Mortar-Methode sind in Bezug auf eine Penalty-Regularisierungsstrategie exemplarisch die Arbeiten von Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b], Yang et al. [2005], Fischer und Wriggers [2005], Fischer und Wriggers [2006] und Puso et al. [2008] zu nennen. Eine Regularisierung der Kontaktbedingungen mit Hilfe einer Augmented-Lagrange-Methode, siehe [Curnier und Alart, 1988], nehmen z. B. Cavaleri und Cardona [2013a] vor. Umgesetzt mit der weit verbreiteten Lagrange-Multiplikator-Methode, welche auf die Lösung eines Sattelpunktpblems führt, erfüllt eine mortar-basierte Kontaktdiskretisierung die integral formulierten Kontaktbedingungen exakt. Für die räumliche Interpolation der Lagrange-

Multiplikatoren, die den im Interface auftretenden Kontaktspannungen entsprechen, kommen häufig Standardansatzfunktionen, die bereits im Rahmen der isoparametrischen h-Version der Finite-Elemente-Methode bei der Approximation der Geometrie und der Feldvariablen Anwendung finden, zum Einsatz. Für die Behandlung von Kontaktproblemstellungen im Rahmen Standard-Mortar-Methode seien z. B. die Aufsätze von Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b], Fischer und Wriggers [2005], Puso et al. [2008], Tur et al. [2009], Hesch und Betsch [2009] und Hesch und Betsch [2011c] genannt. Alternativ hierzu schlägt Wohlmuth [2000] die Konstruktion des Lagrange-Multiplikator-Lösungsraums auf Basis von dualen Formfunktionen vor, siehe hierzu auch [Wohlmuth, 2001]. Im Gegensatz zur Interpolation mit klassischen Ansatzfunktionen können so die diskreten Kopplungsvariablen (Lagrange-Multiplikatoren) durch eine einfache statische Kondensationsoperation aus dem zu lösenden linearisierten Gleichungssystem eliminiert werden. Außerdem ergeben sich, ohne Einfluss auf die Optimalität der Mortar-Methode zu nehmen, einfach zu realisierende knotenweise entkoppelte Übergangsbedingungen. Anwendungen der Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation auf kinematisch lineare Kontaktprobleme finden sich beispielsweise in [Hüeber und Wohlmuth, 2005; Hüeber et al., 2005; Hüeber et al., 2008; Hüeber, 2008; Hüeber und Wohlmuth, 2009; Hüeber und Wohlmuth, 2012]. Die Erweiterung auf Kontaktprobleme mit großen Deformationen wurde in [Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann und Ramm, 2008] vorgestellt und in [Popp et al., 2009] um weitere technische Details, wie einem segmentbasierten Quadraturkonzept und der zugehörigen konsistenten Linearisierung, rigoros voran getrieben. Erfolgreiche Umsetzungen dieses segmentbasierten Quadraturkonzepts, welches mit dem Ziel einer hohen Genauigkeit eine Segmentierung in stetig definierte Abschnitte zur Auswertung der Integranden der Mortar-Integrale vornimmt, finden sich u. a. auch in [Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Yang et al., 2005; Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann und Ramm, 2008; Hesch und Betsch, 2009; Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Gitterle et al., 2010; Cichosz und Bischoff, 2011; Hesch und Betsch, 2011c; Popp, 2012; Popp et al., 2012; Gitterle, 2012; Cavalieri und Cardona, 2013a; Popp et al., 2013; Popp und Wall, 2014; Farah et al., 2015; Farah et al., 2017]. Eine alternative Integrationstechnik zur Berechnung der Mortar-Integrale, welche auf die Einführung von sogenannten Mortar-Segmenten verzichtet und eine elementweise Integration auf einer der Kontaktoberflächen vollführt, stellen [Fischer und Wriggers, 2005] vor. Um eine adäquate Genauigkeit in Bezug auf den Raumintegrationsfehler zu erzielen, ist eine entsprechend große Anzahl an Quadraturpunkten erforderlich. Allerdings ergeben sich bei moderaten Genauigkeitsvorgaben im Vergleich zum segmentbasierten Quadraturkonzept deutliche Effizienzvorteile. Ein solches elementweise ausgeführtes Quadraturkonzept wird auch in [Fischer und Wriggers, 2006; Tur et al., 2009; Tur et al., 2012] verwendet.

Die Mehrheit der zuvor aufgelisteten Aufsätze behandelt die Kontaktproblematik aus Sicht der klassischen h-Version der Methode der finiten Elemente. Mit dem Aufkommen des isogeometrischen Berechnungskonzepts wurden jedoch auch Forschungsbestrebungen in dieser Richtung unternommen. Infolge der direkten Übertragung der NURBS-basierten Oberflächenbeschreibungen aus dem CAD-Programm vereint eine auf Grundlage einer isogeometrischen Oberflächenbeschreibung konstruierte Kontaktformulierung a priori die Vorteile eines Glättungsalgorithmus. Letzterer glättet nachträglich die mit Elementen niedriger Ordnung erzeugte, facettierte Oberfläche. Kontaktformulierungen auf Basis des

isogeometrischen Finite-Elementkonzepts wurden beispielsweise erfolgreich in [Lu, 2011; De Lorenzis et al., 2011; Temizer et al., 2011; Temizer, 2012; Temizer et al., 2012; De Lorenzis et al., 2012; Kim und Youn, 2012; Matzen et al., 2013; De Lorenzis et al., 2014; Dimitri et al., 2014; Dittmann et al., 2014; Matzen, 2015; Seitz et al., 2016] implementiert.

Weitere Fragestellungen, welche sich mit Bezug zur Methode der finiten Elemente auf die Kontaktmodellierung beziehen, betreffen die globale Kontaktsuche, die Realisierung von Netzadaptivität, siehe hierzu [Wriggers und Scherf, 1995; Carstensen et al., 1999; Hüeber und Wohlmuth, 2012], eine kovariante Oberflächenbeschreibung, das Einbeziehen von allgemeinen Interfaceeffekten, eine robuste Zeitintegration im Kontext zur Dynamik und viele andere mehr. Effiziente globale Suchstrategien zum Auffinden der Kontaktpartner beschreiben beispielsweise Zhi-Hua und Nilsson [1989], Williams und O'Connor [1999], Yang und Laursen [2007], Yang und Laursen [2008] und Yastrebov und Breitskopf [2013]. Darüber hinaus lässt sich unabhängig von der zugrunde liegenden Kontaktdiskretisierung auch eine kovariante Beschreibung des Kontakts, siehe [Schweizerhof und Konyukhov, 2005], entwickeln. Die Kontaktbedingungen werden dazu in einem lokalen Koordinatensystem auf einem der beiden deformierten Körper formuliert. Weitere Details sind den Arbeiten von Konyukhov und Schweizerhof [2006], Konyukhov und Schweizerhof [2010], Izi et al. [2012], Izi et al. [2013] und Konyukhov und Izi [2015] zu entnehmen. Abgesehen von einer Vielzahl an Beiträgen in Fachzeitschriften findet sich eine umfassende Einführung zu den meisten in diesem Absatz benannten Themen auch in den Textbüchern von Laursen [2003] und Wriggers [2006].

1.3 Zielsetzung

Die übergeordnete Zielsetzung der vorliegenden Arbeit besteht in der numerischen Umsetzung gekoppelter Problemstellungen im Kontext der Entwicklung einer effizienten globalen Lösungsstrategie. Dabei steht die effiziente Umsetzung von Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung auf die zugrunde liegenden ODE- und DAE-Systeme im Rahmen einer konsistenten Raum-Zeitdiskretisierung im Vordergrund. Unter Berücksichtigung dieses Primärziels setzt sich die Arbeit aus zwei Teilen zusammen.

Der erste Teil der vorliegenden Arbeit beschäftigt sich mit dem Verhalten von Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung vom Runge-Kutta-Typ und der Generalized- α Methode im Bereich der nichtlinearen Strukturdynamik. Hierbei stehen Analysen zu Forderungen wie Lösungsqualität, Robustheit und Effizienz im Mittelpunkt der Untersuchungen. Neben isothermen Betrachtungen werden in einem zweiten Schritt die dynamischen Untersuchungen auf thermomechanisch gekoppelte Prozesse ausgeweitet. Nach Durchführung entsprechender Fehleranalysen wird die Applizierbarkeit von fehlerbasierten Strategien zur adaptiven Zeitschrittsteuerung für die behandelten Klassen von Zeitintegrationsverfahren im Bereich der Dynamik geprüft.

Der zweite Teil dieser Arbeit untersucht das Verhalten der benannten Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung unter Kontaktvorgängen bei großen Deformationen. Hierbei liegt unter anderem der Fokus auf der Einbettung der mortar-basierten Kontaktformulierung in die bereits bestehende globale Lösungsprozedur. Dabei soll die typisch geschachtelte FE-Struktur, welche charakteristisch für die Verwendung von Konstitu-

tivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp ist, bewahrt werden. Mit dem Entwurf eines effizienten und robusten Lösungsalgorithmus ist auch die Erwartung verbunden, Aussagen über die Genauigkeit der erhaltenen Näherungslösung treffen zu können.

Alle beschriebenen Algorithmen und Methoden werden als Teil der Arbeit in das hauseigene Finite-Elemente-Programm *Tasafem* (siehe [Hartmann, 2006a]), welches am Institut für Technische Mechanik der TU-Clausthal entwickelt wird, implementiert.

1.4 Gliederung der Arbeit

Nachfolgend wird der Aufbau der vorliegenden Monographie anhand einer kapitelweisen Übersicht dargestellt.

Kapitel 2 vermittelt im Rahmen einer geometrisch nichtlinearen Theorie zunächst die kontinuumsmechanischen Grundlagen zur Beschreibung der Kinematik deformierbarer Körper. Anknüpfend hieran werden die Kinetik sowie die Bilanzaussagen für die Masse, den Impuls, den Drehimpuls, die Energie und die Entropie vorgestellt. Für eine geometrisch linearisierte Theorie folgt im darauf folgenden Abschnitt eine Präsentation der korrespondierenden kinematischen und kinetischen Größen sowie der Bilanzgleichungen. Nach einer kurzen Diskussion grundlegender Prinzipien der Materialmodellierung im Sinne einer thermomechanisch konsistenten Materialtheorie werden die für diese Arbeit relevanten Konstitutivmodelle, welche in verschiedenen numerischen Beispielen Verwendung finden, vorgestellt.

Kapitel 3 geht auf die kontinuumsmechanische Beschreibung der Kontaktinteraktion zwischen zwei deformierbaren Körpern im Rahmen großer Deformationen ein. Dabei liegt der Fokus auf der Darstellung der Kontaktkinematik sowie auf der Formulierung von Kontaktbedingungen in normaler und tangentialer Richtung.

In **Kapitel 4** erfolgt nach Definition der starken Form für das in dieser Arbeit betrachtete thermomechanisch gekoppelte Zweifeldproblem der Übergang zur kongruenten Variationsformulierung. Anschließend wird eine analoge Vorgehensweise auf das strukturmekanische Anfangs-Randwertproblem (**ARWP**) mit Kontakt appliziert, wobei für die Berücksichtigung der Kontaktbedingungen die Lagrange-Multiplikator-Methode Anwendung findet. Hieraus resultiert die schwache Formulierung des behandelten Kontaktproblems. Die schwachen Formen bilden den Ausgangspunkt für die sequentiell nacheinander ausgeführte räumliche und zeitliche Diskretisierung. Das Kapitel schließt mit einem kurzen Überblick zu Lösungsstrategien für die Behandlung von Kontakt ab. Anhand eines einfachen eindimensionalen Beispiels werden neben der Lagrange-Multiplikator-Methode weitere Konzepte zur Regularisierung der Kontaktbedingungen vorgestellt.

Kapitel 5 befasst sich ausführlich mit den Schritten zur Entwicklung einer globalen Lösungsprozedur im Kontext der durch die vertikale Linienmethode vorgegebenen Trennung von räumlicher und zeitlicher Diskretisierung. Unter Ausblendung von Kontaktinteraktionen wird zunächst für das aufgestellte thermomechanische Anfangs-Randwertproblem die räumliche Diskretisierung basierend auf dem klassischen isoparametrischen Elementkonzept der h -Version der Finite-Elemente-Methode erläutert. Hierauf folgt die Zeitdiskretisierung mit diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren oder der impliziten Generalized- α Methode. Die resultierenden nichtlinearen Gleichungssysteme werden mit

Hilfe des Mehrebenen-Newton-Verfahren gelöst. Im Hinblick auf eine Implementierung fügt sich nahtlos ein Abschnitt zur konsistenten Linearisierung mit den abgeleiteten Tangenten an. Um die Genauigkeit und Verlässlichkeit der Ergebnisse sicherzustellen, werden in Abschnitt 5.2 außerdem Strategien für eine adaptive Schrittweitenkontrolle vorgestellt. Die Entwicklung einer globalen Lösungsprozedur zur Behandlung von Kontaktproblemen erfolgt in den Abschnitten 5.5 bis 5.9. Dazu wird der durch die mortar-basierte Finite-Elemente-Methode charakterisierte Raumdiskretisierungsoperator auf die schwache Formulierung des strukturellen Kontaktsystems angewendet, wobei der Fokus der Darstellungen auf der Beschreibung der Interfacediskretisierung liegt. Umfangreiche technische Erläuterungen zur Durchführung der Quadratur der Mortar-Kopplungsterme sowie die Präsentation geeigneter Lagrange-Multiplikator Interpolationen geben Hinweise zur Implementation der mortar-basierten Kontaktformulierung in 2D und in 3D. Weiterhin adressiert Abschnitt 5.5 mit Bezug zur semidiskreten Gleichungsstruktur die Fragestellung nach der Festlegung des aktiven bzw. inaktiven Kontaktknotensatzes. Im Sinne der vertikalen Linienmethode widmet sich Abschnitt 5.6 der Zeitdiskretisierung, bezogen auf die mit der mortar-basierten Kontaktformulierung assoziierten Raumdiskretisierungsgrößen. Das nichtlineare effektive Strukturgleichungssystem wird im darauffolgenden Abschnitt einer konsistenten Linearisierung unterzogen, sodass die linearisierten Beziehungen den vollständigen Ablauf der globalen Lösungsprozedur, inklusive einer eingearbeiteten Aktiven-Mengen-Strategie, aufzeigen. Abschließend zu den Darstellungen der globalen Lösungsprozedur wird die Kondensation der Kontaktspannung im Zusammenhang mit der Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation erläutert. Die verbleibenden zwei Abschnitte 5.8 und 5.9 adressieren die Umsetzung der globalen Kontaktsuche und eine von Cichosz und Bischoff [2011] und Popp et al. [2013] vorgeschlagene Skalierungstechnik zur Stabilisierung des Konvergenzverhalten einer mortar-basierten Finite-Elemente-Methode.

Um das numerische Verhalten und die Leistungsfähigkeit der hier entwickelten Lösungsprozedur zu untersuchen, werden in **Kapitel 6** die Resultate einer umfangreichen Auswahl von Beispielrechnungen vorgestellt.

Kapitel 7 fasst die wesentlichen Erkenntnisse der Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick auf weitere aussichtsreiche Forschungsaktivitäten.

2 Grundlagen der Kontinuumsmechanik

Die Kontinuumsmechanik wird in die Kategorie der phänomenologisch geprägten Feldtheorien eingeordnet. Sie beschreibt eine Theorie, die es ermöglicht, komplexe physikalische Wechselwirkungen von Körpern auf einer makroskopischen Ebene ohne Kenntnis der zu Grunde liegenden Mikrostruktur zu beschreiben. Im Rahmen der Kontinuumsmechanik wird die diskrete Struktur der Materie unter Beachtung des Größenmaßstabes, welcher mittels der Gitterstruktur, den Molekülen und den Atomen beschreibbar ist, in ein makroskopisches, phänomenologisches Modell, das sogenannte Kontinuum, überführt. Infolge der Homogenisierung wird der diskrete Aufbau der Materie ignoriert und die Annahme einer stetigen Ausfüllung des Raumes mit Materie tritt in den Vordergrund. Als Konsequenz dieser Annahme sind Vorhersagen basierend auf kontinuumsmechanischen Modellen nicht exakt. Dennoch scheinen sie ausreichend für viele Ingenieursanwendungen zu sein. Dies führt zur Entwicklung von Feldformulierungen mit skalar-, vektor- und tensorwertigen Funktionen in Raum und Zeit. Exemplarisch seien an dieser Stelle das Verschiebungs-, Geschwindigkeits- und Temperaturfeld genannt. Die Feldgleichungen können in allgemeine materialunabhängige Aussagen, welche gleichermaßen für Festkörper als auch Fluide gelten, und in individuelle materialabhängige Aussagen klassifiziert werden. Die zuerst genannte Gruppe umfasst an Aussagen kinematische Beziehungen, die zur Beschreibung der Bewegung und der Deformation eines materiellen Körpers \mathcal{B} , ohne Berücksichtigung der Ursachen, herangezogen werden. Hinzu kommen die Bilanzgleichungen, in denen allgemeingültige Erfahrungssätze der Thermomechanik zusammengefasst sind. Der dritte Satz an Aussagen behandelt konstitutive Beziehungen, die das individuelle materialabhängige Verhalten des Kontinuums reflektieren. Die Kontinuumsmechanik bietet somit das notwendige mathematische Fundament zur Lösung eines thermomechanischen Problems. Die präsentierte Theorie in den nachfolgenden Abschnitten orientiert sich an den Lehrbüchern von Holzapfel [2000], Haupt [2002], Hutter und Jöhnk [2004] und Altenbach [2015] sowie dem Vorlesungsskript von Helm [2003].

2.1 Kinematik

Die Kinematik betrachtet ausschließlich die geometrischen Aspekte der Bewegung materieller Körper ohne Berücksichtigung der treibenden Kräfte. Aus der Erfahrung ist bekannt, dass ein aus Materie bestehender Körper in Abhängigkeit der Zeit seine Lage und seine Form ändern kann und somit unterschiedlichste Bewegungsformen vollführt. Die Gesamtheit dieser Bewegungen, d. h. die Überlagerung von Volumen- und Gestal-

tänderungen sowie nur die Lage ändernde Starrkörperbewegungen,¹ werden auch unter dem Begriff Deformation zusammengefasst. Die reine Betrachtung von Verformungen unter Ausblendung jeglicher Starrkörperbewegungen führt zu dem Terminus Verzerrung. In diesem Abschnitt werden zunächst der Begriff der Konfiguration sowie die Bewegung bzw. die Deformation eines materiellen Körpers erläutert. Ferner wird die fundamentale Größe des Deformationsgradienten definiert, welcher Aussagen zur lokalen Deformation liefert. Basierend auf dieser bedeutenden Größe werden Verzerrungsmaße und Verzerrungsgeschwindigkeiten veranschaulicht.

2.1.1 Konfiguration und Bewegung

Das grundlegende Konzept im Rahmen der Kontinuumsmechanik ist die Annahme der kontinuierlichen Verteilung von Materie in einem Teilbereich des Raumes. Dieses ausgefüllte Gebiet führt mathematisch auf die Definition des materiellen Körpers $\mathcal{B} = \{\mathcal{P}\}$ als eine stetige Menge von materiellen Punkten \mathcal{P} . Ein materieller Körper \mathcal{B} besitzt die Eigenschaft, dass eine eindeutige Abbildung

$$\chi: \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \chi[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto (x_1, x_2, x_3) = \chi(\mathcal{P}) \iff \mathcal{P} = \chi^{-1}(x_1, x_2, x_3) \end{cases} \quad (2.1)$$

existiert, welche jedem materiellen Punkt $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ ein reellwertiges Zahlentripel $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ zuordnet. Die Abbildung $\chi \in \mathcal{K}$ wird als Konfiguration bezeichnet. Des Weiteren wird gefordert, dass die Hintereinanderschaltung von zwei Konfigurationen stetig differenzierbar ist.² Die Bewegung bzw. die Deformation eines materiellen Körpers ist nun definiert durch eine in der Zeit t parametrisierte Sequenz von Konfigurationen

$$t \mapsto \chi_t: \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \chi_t[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto (x_1(t), x_2(t), x_3(t)) = \chi_t(\mathcal{P}) \iff \mathcal{P} = \chi_t^{-1}(x_1(t), x_2(t), x_3(t)), \end{cases} \quad (2.2)$$

wobei die zeitabhängige Konfiguration χ_t als Momentankonfiguration bezeichnet wird und die Zeit t als skalare monoton zunehmende Größe ein zeitliches Bezugssystem definiert. Während der Bewegung durchläuft der materielle Körper eine kontinuierliche Folge von Konfigurationen, siehe Abb. 2.1a.

Zur Eliminierung des abstrakten Begriffs des materiellen Punktes wird eine willkürliche aber fixierte Konfiguration

$$\mathcal{R}: \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto (X_1, X_2, X_3) = \mathcal{R}(\mathcal{P}) \iff \mathcal{P} = \mathcal{R}^{-1}(X_1, X_2, X_3) \end{cases} \quad (2.3)$$

¹Unter Starrkörperbewegungen sind Bewegungsformen zu verstehen, die nicht mit einer Änderung des relativen Abstands zwischen benachbarten materiellen Punkten einhergehen. Für eine mathematische Interpretation der Starrkörperbewegungen wird auf [Holzapfel, 2000; Helm, 2003; Altenbach, 2015] verwiesen.

²Die Eigenschaft der Eindeutigkeit impliziert, dass sich ein materieller Punkt nur an einer Raumposition befinden kann und sich kein weiterer materieller Punkt gleichzeitig an dem selben Ort aufhält. Die stetige Differenzierbarkeitsanforderung zweier hintereinander geschalteter Konfigurationen führt dazu, dass benachbarte Punkte stets benachbart bleiben.

als sogenannte Referenzkonfiguration gewählt. Innerhalb dieser ist jeder materielle Punkt $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ durch das Zahlentripel $(X_1, X_2, X_3) \in \mathbb{R}^3$ gekennzeichnet. Aufgrund der Beliebbarkeit wird aus pragmatischen Gründen angenommen, dass die Ausgangskonfiguration bzw. die Bezugskonfiguration χ_{t_0} zum Zeitpunkt $t = t_0$ mit der Referenzkonfiguration zusammenfällt,³ d. h. es gilt $\mathcal{R} = \chi_{t_0}$. Für die weiteren Betrachtungen ist es außerdem zweckmäßig, die Zahlentripel in Gl. (2.2) und Gl. (2.3) als Koordinaten von Punkten im dreidimensionalen Euklidischen Punktraum \mathbb{E}^3 zu interpretieren. Mit Festlegung eines einheitlichen räumlichen Bezugssystems für alle Konfigurationen,⁴ durch Definition eines Ursprungs \mathcal{O} und Wahl einer kartesischen Orthonormalbasis \vec{e}_i , gelingt es für den materiellen Punkt \mathcal{P} die Ortsvektoren $\vec{X} = X_k \vec{e}_k$ und $\vec{x} = x_i \vec{e}_i$ innerhalb der Referenz- und Momentankonfiguration anzugeben, siehe Abb. 2.1b. Hierbei entsprechen \vec{X} und

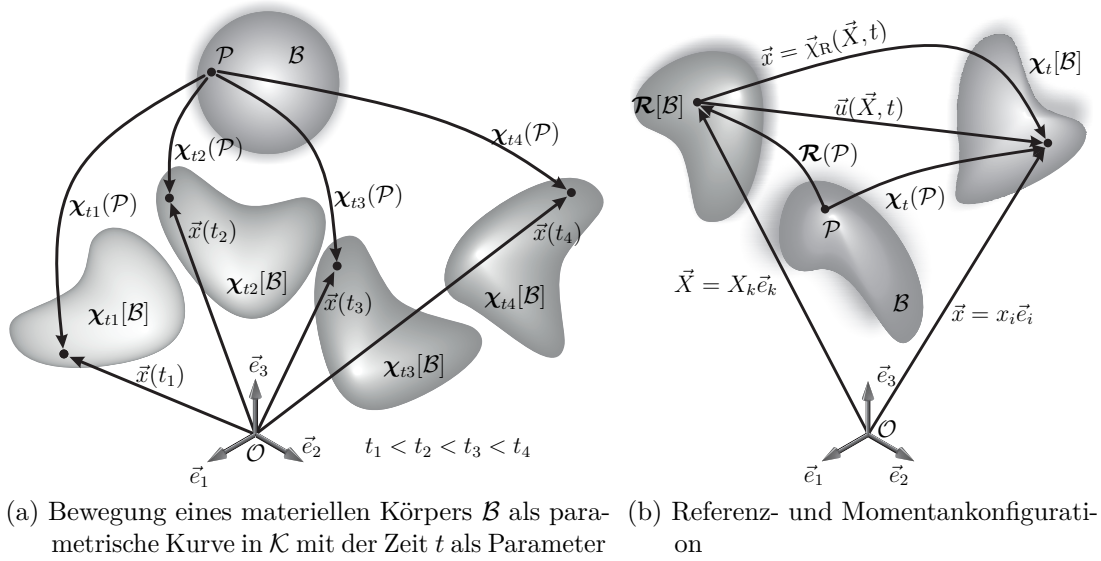


Abbildung 2.1: Konfigurationen

\vec{x} geometrischen Vektoren aus dem dreidimensionalen Euklidischen Vektorraum \mathbb{V}^3 . In dieser Arbeit wird vorzugsweise ein kartesisches Koordinatensystem verwendet, sodass die Zahlentripel in Gl. (2.2) und Gl. (2.3) als kartesische Koordinaten interpretierbar sind.⁵ Die Zahlentripel (X_1, X_2, X_3) und (x_1, x_2, x_3) werden häufig in Anlehnung an eine Lagrangesche bzw. Eulersche Darstellung auch als materielle und räumliche Koordinaten bezeichnet, siehe Abschnitt 2.1.2. Als Resultat der Einführung des Bezugssystems kann

³Im Allgemeinen ist es nicht erforderlich, dass der materielle Körper im Verlauf der Deformation die Referenzkonfiguration einnimmt. Sie dient lediglich der “Namensgebung” eines materiellen Punktes. So gibt es Anwendungen, wie z. B. die Definition von isoparametrischen Ansatzfunktionen, siehe Abschnitt 5.1, bei denen es durchaus sinnvoll ist, eine rein fiktive Referenzkonfiguration zu definieren.

⁴Im Allgemeinen können verschiedene Bezugssysteme für die Referenz- und Momentankonfiguration verwendet werden.

⁵Die Darstellung basierend auf kartesischen Koordinaten wurde nur zur Verdeutlichung des Sachverhaltes gewählt. Eine allgemeinere Veranschaulichung mit krummlinigen Koordinaten und unterschiedlichen Bezugssystemen für die Referenz- und Momentankonfiguration ist in den Abhandlungen von Marsden und Hughes [1994] und Haupt [2002] zu finden.

die Bewegung des materiellen Körpers als vektorwertige Funktion

$$\vec{\chi}_{\mathbf{R}}: \begin{cases} \mathcal{R} \times \mathbb{R}^+ & \rightarrow \chi_t[\mathcal{B}] \\ (\vec{X}, t) & \mapsto \vec{x} = \vec{\chi}_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) = \chi_t(\mathcal{R}^{-1}(\vec{X})) \end{cases} \quad (2.4)$$

in Abhängigkeit des Ortsvektors $\vec{X} \in \mathbb{V}^3$ in der Referenzkonfiguration⁶ und der Zeit $t \in \mathbb{R}^+$ dargestellt werden, wobei nun die Referenzkonfiguration \mathcal{R} und Momentankonfiguration χ_t Abbildungen in den Euklidischen Vektorraum \mathbb{V}^3 kennzeichnen.⁷ Der absolute Verschiebungsvektor, als fundamentale Größe der Kinematik, wird ausgedrückt durch

$$\vec{u}(\vec{X}, t) = \vec{x} - \vec{X} = \vec{\chi}_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) - \vec{X} \quad (2.5)$$

und ist in Abb. 2.1b veranschaulicht.

2.1.2 Lagrangesche und Eulersche Betrachtungsweise sowie Zeitableitungen

Viele relevante Prozesse sind zeitabhängig. Dies führt dazu, dass Zeitableitungen von einer Vielzahl verschiedener Feldgrößen, z. B. bei der Formulierung von Bilanzgleichungen oder konstitutiven Beziehungen, benötigt werden. Im Rahmen der Kontinuumsmechanik werden verschiedene Betrachtungsweisen unterschieden, die maßgeblich die Berechnung von Zeitableitungen prägen. Hierzu sei kurz auf die Lagrangesche und die Eulersche Darstellung einer beliebigen physikalischen, skalarwertigen Größe $\varsigma = f(\mathcal{P}, t)$ ⁸ eingegangen, die an einem materiellen Punkt \mathcal{P} zu einer bestimmten Zeit t vorliegt. Zumeist charakterisiert ς eine Eigenschaft des materiellen Körpers. Die Substitution des materiellen Punktes \mathcal{P} durch den Ortsvektor \vec{X} der Referenzkonfiguration führt auf die sogenannte materielle oder Lagrangesche Darstellung

$$\hat{f}: (\vec{X}, t) \mapsto \varsigma = \hat{f}(\vec{X}, t) = f(\mathcal{R}^{-1}(\vec{X}), t) \quad (2.6)$$

der physikalischen Größe $\varsigma = f(\mathcal{P}, t)$. Bildlich veranschaulicht bedeutet dies, dass ein fest mit dem materiellen Punkt \mathcal{P} verbundener Beobachter direkt die Eigenschaft bzw. deren Veränderungen misst. Durch Ersetzung des materiellen Punktes \mathcal{P} mit Hilfe

⁶Im Fall einer allgemein gewählten Referenzkonfiguration ist die Anschauung von \vec{X} als Ortsvektor nicht gegeben.

⁷Aufgrund der Interpretation des Zahlentripels (X_1, X_2, X_3) bzw. (x_1, x_2, x_3) als Koordinaten eines Raumpunktes $\hat{P} \in \mathbb{E}^3$ können die Referenz- und Momentankonfiguration auch als Transformationsvorschriften verstanden werden, die einen materiellen Punkt \mathcal{P} in den Euklidischen Vektorraum \mathbb{V}^3 abbilden:

$$\mathcal{R}: \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \mathbb{V}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto \vec{X} = \mathcal{R}(\mathcal{P}) \iff \mathcal{P} = \mathcal{R}^{-1}(\vec{X}) \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad \chi_t: \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \chi_t[\mathcal{B}] \subset \mathbb{V}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto \vec{x} = \chi_t(\mathcal{P}) \iff \mathcal{P} = \chi_t^{-1}(\vec{x}) \end{cases}$$

⁸Prinzipiell kann ς eine physikalische tensorielle Größe beliebiger Stufe symbolisieren. Zur Vereinfachung sei jedoch ς als eine skalarwertige Variable angenommen.

des Ortsvektors in der aktuellen Konfiguration \vec{x} kann die physikalische Größe in der sogenannten räumlichen oder Eulerschen Darstellung

$$\bar{f}: (\vec{x}, t) \mapsto \varsigma = \bar{f}(\vec{x}, t) = f(\chi_t^{-1}(\vec{x}), t) \quad (2.7)$$

betrachtet werden. Dies entspricht einem im Raumpunkt \vec{x} fixierten Beobachter, der zum Zeitpunkt t einen materiellen Punkt \mathcal{P} passieren sieht. Der Beobachter ist in der Lage, die physikalische Größe zu messen, jedoch nicht die dem Partikel zugeordnete Änderung dieser Eigenschaft. Er misst lediglich Änderungen der physikalischen Größe, die sich durch das Passieren unterschiedlicher materieller Punkte zu verschiedenen Zeiten in dem raumfesten Punkt ergeben, siehe [Altenbach, 2015]. Zudem können die beiden Darstellungen mit den folgenden Beziehungen

$$\hat{f}(\vec{X}, t) = \bar{f}(\vec{\chi}_R(\vec{X}, t), t), \quad (2.8)$$

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \hat{f}(\vec{\chi}_R^{-1}(\vec{x}, t), t) \quad (2.9)$$

ineinander überführt werden.

Essentielle Bedeutung in der Kontinuumsmechanik besitzt die sogenannte materielle Zeitableitung⁹

$$\dot{\varsigma} = \dot{f}(\mathcal{P}, t) = \frac{d}{dt}f(\mathcal{P}, t), \quad (2.10)$$

die eine dem materiellen Punkt \mathcal{P} zugeordnete zeitliche Änderung der physikalischen Größe ς wiedergibt. Aufgrund der fixierten Referenzkonfiguration stimmt die materielle Zeitableitung der physikalischen Größe in der Lagrangeschen Darstellung mit der partiellen Ableitung nach der Zeit

$$\dot{\varsigma} = \frac{\partial \hat{f}(\vec{X}, t)}{\partial t} \quad (2.11)$$

überein. Die materielle Zeitableitung in der Eulerschen Darstellung $\varsigma = \bar{f}(\vec{x}, t)$ ergibt sich durch die Berechnung der totalen Ableitung. Unter Zuhilfenahme der Kettenregel folgt

$$\dot{\varsigma} = \frac{d}{dt}\bar{f}(\vec{\chi}_R(\vec{X}, t), t) = \frac{\partial \bar{f}(\vec{x}, t)}{\partial t} + \{\text{grad } \bar{f}(\vec{x}, t)\} \cdot \frac{\partial}{\partial t}\vec{\chi}_R(\vec{X}, t). \quad (2.12)$$

Das verknüpfende Produkt zwischen dem Gradientenoperator in der Momentankonfiguration¹⁰ und der partiellen Ableitung der Bewegung variiert je nach vorliegender tensorieller Größe ς .

Unter Berücksichtigung der allgemeinen Definition für die Bewegung ist es nun möglich, die Begriffe Geschwindigkeit und Beschleunigung zu definieren. Das Geschwindigkeitsfeld in der Lagrangeschen Darstellung ergibt sich aus der ersten materiellen Zeitableitung von $\vec{\chi}_R(\vec{X}, t)$ bzw. $\vec{u}(\vec{X}, t)$, d. h. es gilt

$$\vec{v} = \hat{v}(\vec{X}, t) = \frac{\partial \vec{\chi}_R(\vec{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \vec{u}(\vec{X}, t)}{\partial t} = \dot{\vec{v}}(\vec{X}, t). \quad (2.13)$$

⁹Die beiden Schreibweisen \dot{f} und df/dt zur Kennzeichnung der materiellen Zeitableitung sind gleichwertig.

¹⁰Der räumliche Gradientenoperator grad bezieht sich auf die Differentiation bezüglich \vec{x} .

Neben der materiellen Betrachtungsweise kann das Geschwindigkeitsfeld unter Ausnutzung von Gl. (2.9) in eine räumliche Feldbeschreibung

$$\vec{v} = \bar{\vec{v}}(\vec{x}, t) = \hat{\vec{v}}(\chi_R^{-1}(\vec{x}, t), t) \quad (2.14)$$

überführt werden. Aufbauend auf der Definition des Geschwindigkeitsfeldes reduziert sich der Ausdruck in Gl. (2.12) für die räumliche Darstellung der materiellen Zeitableitung einer physikalischen Größe ς ¹¹ zu

$$\dot{\varsigma} = \frac{d}{dt} \bar{f}(\chi_R(\vec{X}, t), t) = \frac{\partial \bar{f}(\vec{x}, t)}{\partial t} + \{\text{grad } \bar{f}(\vec{x}, t)\} \cdot \bar{\vec{v}}(\vec{x}, t). \quad (2.15)$$

Unter Verwendung dieser Basis als Ausgangspunkt wird es möglich, die Beschleunigung als materielle Zeitableitung des Geschwindigkeitsfeldes in einer materiellen Darstellung

$$\vec{a} = \hat{\vec{a}}(\vec{X}, t) = \frac{\partial \hat{\vec{v}}(\vec{X}, t)}{\partial t} = \dot{\vec{v}}(\vec{X}, t) = \frac{\partial^2 \chi_R(\vec{X}, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \vec{u}(\vec{X}, t)}{\partial t^2} = \ddot{\vec{u}}(\vec{X}, t) \quad (2.16)$$

oder für eine räumliche Feldbeschreibung

$$\vec{a} = \bar{\vec{a}}(\vec{x}, t) = \frac{\partial \bar{\vec{v}}(\vec{x}, t)}{\partial t} + [\text{grad } \bar{\vec{v}}(\vec{x}, t)] \bar{\vec{v}}(\vec{x}, t) \quad (2.17)$$

anzugeben.

Für die weiteren Ausführungen wird entgegen einer mathematisch korrekten Notation und zur Vereinfachung der Schreibweise die Unterscheidung von materieller und räumlicher Betrachtung bei den Funktionsbezeichnungen fallen gelassen. Lediglich die Kombination der Funktionsargumente gibt Aufschluss über die gewählte Betrachtungsweise. Des Weiteren wird wie in vielen anderen Veröffentlichungen und zur Präzisierung der Notation bei den meisten physikalischen Größen auf eine Unterscheidung von Funktionswert und Funktionsabbildung verzichtet. Unter Beachtung dieser mathematisch etwas ungenauen Ausdrucksweise wird z. B. die Geschwindigkeit in der Lagrangeschen Betrachtungsweise durch $\vec{v} = \vec{v}(\vec{X}, t)$ und unter Zuhilfenahme der Eulerschen Feldbeschreibung als $\vec{v} = \vec{v}(\vec{x}, t)$ wiedergegeben. Darüber hinaus wird zur Verdichtung der Schreibweise an Stellen mit einer eindeutig gekennzeichneten Betrachtungsweise auf eine Auflistung der abhängigen Größen verzichtet.

2.1.3 Deformationsgradient und Deformationstensoren

Eine wesentliche Größe in der Kontinuumsmechanik, welche die lokalen Eigenschaften der Deformation in der Nähe eines materiellen Punktes charakterisiert, ist der Deforma-

¹¹Die materielle Zeitableitung einer physikalischen Größe in der räumlichen Darstellung setzt sich aus einer lokalen Ableitung $\partial \bar{f}(\vec{x}, t)/\partial t$ und einer sogenannten konvektiven Ableitung zusammen. Die konvektive Ableitung

$$D_{\bar{\vec{v}}} \bar{f}(\vec{x}, t)[\bar{\vec{v}}] = \left. \frac{d}{d\epsilon} [\bar{f}(\vec{x} + \epsilon \bar{\vec{v}}, t)] \right|_{\epsilon=0} = \{\text{grad } \bar{f}(\vec{x}, t)\} \cdot \bar{\vec{v}}(\vec{x}, t)$$

ist identisch mit dem Gateaux-Differential (Richtungsableitung) in Richtung des Geschwindigkeitsvektors.

tionsgradient¹²

$$\mathbf{F}(\vec{X}, t) = \frac{\partial \vec{\chi}_R(\vec{X}, t)}{\partial \vec{X}} = \text{Grad } \vec{\chi}_R(\vec{X}, t). \quad (2.18)$$

Der Deformationsgradient stimmt mit der Fréchet-Ableitung¹³ der Deformationsabbildung $\vec{\chi}_R(\vec{X}, t)$ bezüglich \vec{X} überein.¹⁴ Die geometrische Bedeutung des Deformationsgradienten als linearer Abbildungsoperator, welcher Tangentenvektoren an materielle Linien $\vec{C}(\alpha)$ in der Referenzkonfiguration (materielle Linienelemente der Referenzkonfiguration $d\vec{X}$) auf materielle Linienelemente in der Momentankonfiguration $d\vec{x}$ transformiert, ist in Abb. 2.2a veranschaulicht.¹⁵ Der Nachweis für die Gültigkeit von Gl. (2.18) lässt sich auf anschauliche Weise mit der in α parametrisierten glatten Raumkurve (materielle Linie in der Referenzkonfiguration)

$$\alpha \mapsto \vec{C}(\alpha), \quad \vec{X} = \vec{C}(\alpha_0) \quad (2.19)$$

zurückführen. Der Tangentenvektor an der Stelle $\vec{X} = \vec{C}(\alpha_0)$ ist gegeben durch

$$d\vec{X} = \left. \frac{d}{d\alpha} \vec{C}(\alpha) d\alpha \right|_{\alpha=\alpha_0} = \vec{C}'(\alpha_0) d\alpha. \quad (2.20)$$

Aufgrund der bijektiven, vektorwertigen, nichtlinearen Bewegungsabbildung $\vec{\chi}_R(\vec{X}, t)$ ist eine aus materiellen Punkten bestehende Linie in der aktuellen Konfiguration definiert als

$$\alpha \mapsto \vec{c}(\alpha) = \vec{\chi}_R(\vec{C}(\alpha), t), \quad \vec{x} = \vec{c}(\alpha_0), \quad (2.21)$$

mit dem Tangentenvektor $d\vec{x} = \vec{c}'(\alpha_0) d\alpha$. Die Anwendung der Kettenregel

$$d\vec{x} = \text{Grad } \vec{\chi}_R(\vec{X}, t) \Big|_{\vec{X}=\vec{C}(\alpha_0)} \overbrace{\vec{C}'(\alpha_0) d\alpha}^{d\vec{X}} \quad (2.22)$$

¹²Der materielle Gradientenoperator Grad bezieht sich auf die Differentiation bezüglich \vec{X} bzw. der Koordinaten in der Referenzkonfiguration.

¹³Gemäß Helm [2003] wird die Fréchet-Ableitung der Bewegung $\vec{\chi}_R(\vec{X}, t)$ als eine Taylor-Reihenentwicklung um \vec{X}_0 definiert, die nach dem ersten Glied abgebrochen wird. Damit resultiert $\vec{\chi}_R(\vec{X}_0 + d\vec{X}, t) - \vec{\chi}_R(\vec{X}_0, t) = \mathbf{F}(\vec{X}_0, t) d\vec{X} + \vec{r}(\vec{X}_0, t, d\vec{X})$. Für das Restglied wird die Bedingung $\lim_{\|d\vec{X} \rightarrow 0\|} \vec{r}(\vec{X}_0, t, d\vec{X}) / \|d\vec{X}\| = 0$ gefordert, sodass aus dem verbleibenden Term die gesuchte Fréchet-Ableitung als \mathbf{F} extrahiert werden kann.

¹⁴Die Definition der Fréchet-Ableitung besitzt den Nachteil, dass sie keine explizite Berechnungsvorschrift impliziert und mitunter auch nur sehr aufwendig für komplexe Funktionen berechenbar ist. Unter der Berücksichtigung hinreichender Stetigkeitsanforderungen an die zu differenzierenden Funktionen stellt das Konzept des Gateaux-Differentials (Richtungsableitung)

$$D_{\vec{X}} \vec{\chi}_R(\vec{X}, t)[d\vec{X}] = \left. \frac{d}{ds} \vec{\chi}_R(\vec{X} + s d\vec{X}, t) \right|_{s=0}$$

ein anwenderfreundliches Werkzeug zur Bestimmung der Fréchet-Ableitung dar.

¹⁵Der Deformationsgradient stellt keinen gewöhnlichen Tensor zweiter Stufe dar. In vielen Veröffentlichungen wie z. B. [Holzapfel, 2000; Altenbach, 2015] wird er als Zweipunkt-Tensor bezeichnet, da er im allgemeinen Fall eine lineare Abbildung zwischen zwei verschiedenen Vektorräumen repräsentiert.

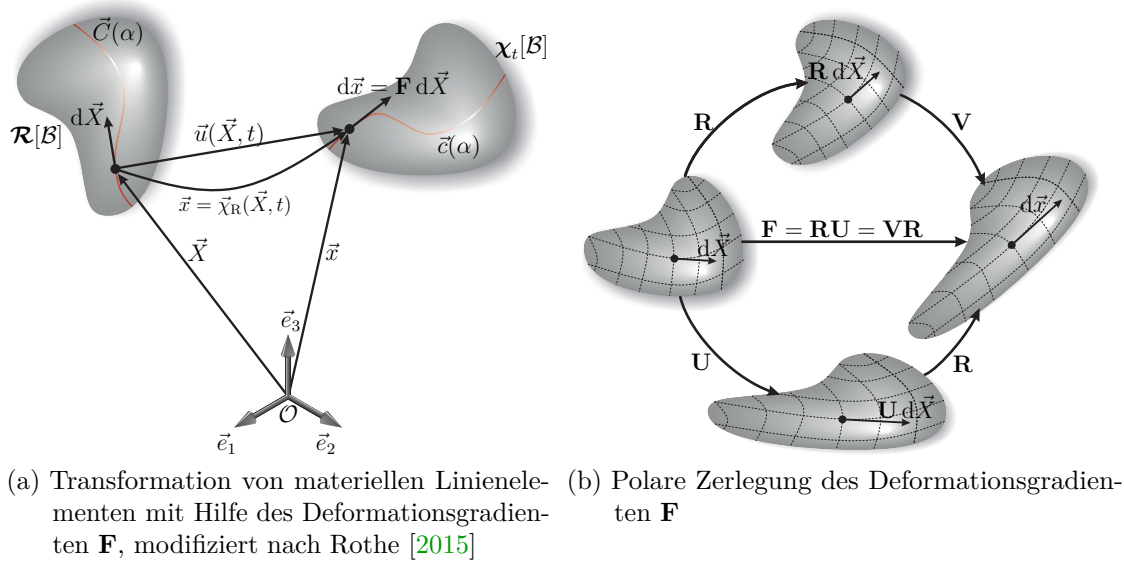


Abbildung 2.2: Transformationsverhalten und polare Zerlegung des Deformationsgradienten \mathbf{F}

führt dann auf die angekündigte Interpretation.¹⁶ Die Anforderungen von Bijektivität- und Stetigkeit an die Bewegung des materiellen Körpers schließen singuläre Deformationsgradienten aus, sodass für die Determinante des Deformationsgradienten $\det \mathbf{F} \neq 0$ gilt und die Invertierbarkeit $\mathbf{F}^{-1} = \partial \vec{\chi}_R^{-1}(\vec{x}, t) / \partial \vec{x}$ sichergestellt ist. Unter Ausschluss einer Selbstdurchdringung des materiellen Körpers resultiert die Schlussfolgerung $\det \mathbf{F} > 0$. Zum Zweck einer prägnanten Darstellung wird im Folgenden die Abkürzung $J := \det \mathbf{F}$ verwendet. Zudem erlaubt die geometrische Interpretation des Deformationsgradienten Beziehungen für die Transformation von materiellen Flächen- und Volumenelementen zwischen Referenz- und Momentankonfiguration anzugeben. Die Transformationsgleichung für die infinitesimalen, orientierten Flächenvektoren $d\vec{A} = \vec{n}_R dA$ in der Referenzkonfiguration und $d\vec{a} = \vec{n} da$ in der Momentankonfiguration lautet

$$d\vec{a} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} d\vec{A}, \quad (2.23)$$

wobei \vec{n}_R bzw. \vec{n} Einheitsnormalenvektoren der Flächenelemente in der Referenz- bzw. Momentankonfiguration symbolisieren. Darüber hinaus ist die Beziehung

$$\begin{aligned} da &= \sqrt{d\vec{a} \cdot d\vec{a}} = (\det \mathbf{F}) \sqrt{\vec{n}_R \cdot (\mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} \vec{n}_R)} dA \\ &= (\det \mathbf{F}) \sqrt{\vec{n}_R \cdot \mathbf{C}^{-1} \vec{n}_R} dA \end{aligned} \quad (2.24)$$

interessant, da Gl. (2.24) eine Deformationsabhängigkeit der infinitesimalen materiellen Flächenelemente ausdrückt, siehe Abschnitt 4.1. Der Tensor \mathbf{C}^{-1} kennzeichnet die Inverse

¹⁶Nach Haupt [2002] entspricht \mathbf{F} einer linearen Abbildung zwischen zwei verschiedenen Tangentialräumen, welche jedoch bei Gültigkeit der Axiome der euklidischen Geometrie mit den Euklidischen Vektorräumen der Referenz- und Momentankonfiguration zusammenfallen. Daher wird weitgehend auf eine solche Unterscheidung verzichtet.

des in Gl. (2.29)₁ eingeführten Deformationstensors \mathbf{C} . Für die Volumendifferentiale (materielle Volumenelemente dV und dv in der Referenz- und Momentankonfiguration) gilt der Ausdruck

$$dv = (\det \mathbf{F}) dV. \quad (2.25)$$

Durch Einführung des Verschiebungsgradienten

$$\mathbf{H}(\vec{X}, t) = \text{Grad } \vec{u}(\vec{X}, t) \quad (2.26)$$

kann der Deformationsgradient auch als

$$\mathbf{F} = \mathbf{1} + \mathbf{H} \quad (2.27)$$

ausgedrückt werden, siehe z. B. [Wriggers, 2008].

Obwohl der Deformationsgradient alle notwendigen Informationen über die lokale Deformation in der Nähe eines materiellen Punktes enthält, eignet er sich nicht als lokales Maß für die Formänderung zur Formulierung von Materialbeziehungen. Dieser Umstand ist der Tatsache geschuldet, dass der Deformationsgradient nicht invariant gegenüber Starrkörperbewegungen des materiellen Körpers ist, d. h. $\mathbf{F} \neq \mathbf{0}$. Jedoch werden aufbauend auf dem Deformationsgradient weitere Maße für die Formänderung definiert.

Beginnend mit dem Satz über die polare Zerlegung des Deformationsgradienten, siehe z. B. [Chadwick, 1999; Haupt, 2002], kann dieser aufgrund seiner Invertierbarkeit eindeutig als Produkt

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R} \quad (2.28)$$

zweier Tensoren dargestellt werden. Die symmetrischen¹⁷ und positiv definiten¹⁸ Tensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} beschreiben eine volumenändernde Streckung (Dilatation) in Richtung ihrer jeweiligen Hauptachsen und werden daher auch als rechter bzw. linker Strecktensor bezeichnet. Der orthogonale¹⁹ Tensor \mathbf{R} entspricht einem Rotationstensor,²⁰ der eine reine Starrkörperrotation charakterisiert. Abbildung 2.2 veranschaulicht diesen Sachverhalt bei dem materielle Linienelemente infolge der lokalen kinematischen Zerlegung $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$ zunächst eine reine Streckung erfahren. Die anschließende Anwendung von \mathbf{R} führt zu einer reinen Drehbewegung des gestreckten materiellen Linienelements. Gl. (2.28)₂ beschreibt die umgekehrte Reihenfolge. Des Weiteren kann gezeigt werden, dass der rechte Strecktensor \mathbf{U} auf der Referenzkonfiguration operiert, wohingegen der linke Strecktensor \mathbf{V} mit der Momentankonfiguration verbunden ist. Die Verbindung zwischen beiden Konfigurationen wird durch den Rotationstensor \mathbf{R} hergestellt, der ebenfalls wie der Deformationsgradient in die Klasse der Zweipunkt-Tensoren einzuordnen ist.

¹⁷Ein Tensor zweiter Stufe ist symmetrisch, wenn $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ gilt.

¹⁸Ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ wird als positiv definit bezeichnet, wenn $\vec{v} \cdot \mathbf{A} \vec{v} > 0$ für alle $\vec{v} \neq \vec{0}$ gilt. Gleichzeitig folgt hieraus $\det \mathbf{A} > 0$.

¹⁹Die Eigenschaft der Orthogonalität impliziert $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T$.

²⁰Aufgrund der Eigenschaft $\det(\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T) = \det \mathbf{Q} \det \mathbf{Q}^T = \det(\mathbf{Q})^2 = 1$ gilt für die Determinante eines orthogonalen Tensors $\det \mathbf{Q} = \pm 1$. Für $\det \mathbf{Q} = +1$ kennzeichnet der Tensor \mathbf{Q} eine reine Rotation, wohingegen für den Fall $\det \mathbf{Q} = -1$ eine Spiegelung der Drehbewegung überlagert ist, siehe [Helm, 2003, S. 73–76].

Anknüpfend an diesen Betrachtungen folgen die Definitionen des rechten und linken Cauchy-Green Tensor,

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{U}^2 \quad \text{und} \quad \mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T = \mathbf{V}^2, \quad (2.29)$$

mit dessen zugehörigen Eigenwertproblemen²¹ es gelingt, die Strecktensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} eindeutig zu identifizieren. Die ebenfalls symmetrischen und positiv definiten Tensoren \mathbf{C} und \mathbf{B} werden im folgenden Abschnitt als Basis zur Definition von geeigneten Verzerrungsmaßen herangezogen.

Neben der polaren Zerlegung existieren eine Reihe weiterer kinematischer und physikalischer Zerlegungen für den Deformationsgradient.²² Nach Flory [1961] kann der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}} \quad (2.30)$$

multiplikativ in einen volumenändernden

$$\hat{\mathbf{F}} = (\det \mathbf{F})^{1/3} \mathbf{1} = J^{1/3} \mathbf{1}, \quad \det \hat{\mathbf{F}} = \det \mathbf{F} = J \quad (2.31)$$

und einen volumenerhaltenden Anteil (gestaltändernder Anteil)

$$\bar{\mathbf{F}} = (\det \mathbf{F})^{-1/3} \mathbf{F} = J^{-1/3} \mathbf{F}, \quad \det \bar{\mathbf{F}} = 1 \quad (2.32)$$

aufgespalten werden.²³ Auf Basis dieser Zerlegung lassen sich weitere deformationsbeschreibende Maße in Anlehnung an Gleichung (2.29) motivieren. Diese sogenannten unimodularen Größen sind definiert als

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{U}}^2 = J^{-2/3} \mathbf{C} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{B}} = \bar{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}}^T = \bar{\mathbf{V}}^2 = J^{-2/3} \mathbf{B}, \quad (2.33)$$

mit $\det \bar{\mathbf{C}} = \det \bar{\mathbf{B}} = \det \bar{\mathbf{U}} = \det \bar{\mathbf{V}} = 1$. Es sei abschließend angemerkt, dass jede multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten eine fiktive Zwischenkonfiguration induziert. Solche fiktiven Zwischenkonfigurationen finden häufig im Rahmen der Materialmodellierung Anwendung, siehe Abschnitt 2.5.

²¹Das zugehörige Eigenwertproblem des ebenfalls symmetrischen und positiv definiten Tensors zweiter Stufe \mathbf{C} ist definiert als $\mathbf{C}\vec{u} = \mu\vec{u}$. Die Berechnung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms liefert die positiven Eigenwerte μ_k , $k = 1, \dots, 3$. Zu jeder Lösung μ_k existiert ein Eigenvektor \vec{u}_k , die zusammen ein orthogonales Basissystem bilden. Folglich hat die Spektraldarstellung von \mathbf{C} die Gestalt $\mathbf{C} = \sum_{k=1}^3 \mu_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k$. Das Bilden der positiven Quadratwurzel aus der Spektraldarstellung führt dann auf den gesuchten Strecktensor $\mathbf{U} = \sum_{k=1}^3 \sqrt{\mu_k} \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k$. Unter Berücksichtigung der Beziehung $\mathbf{V} = \mathbf{R}^T \mathbf{U} \mathbf{R}$ lautet die Spektraldarstellung des linken Strecktensors $\mathbf{V} = \sum_{k=1}^3 \sqrt{\mu_k} \vec{v}_k \otimes \vec{v}_k$, mit den gedrehten Eigenrichtungen $\vec{v}_k = \mathbf{R} \vec{u}_k$. Für eine tiefergehende Betrachtung der Eigenwertproblematik von Tensoren zweiter Stufe wird auf [Klingbeil, 1966; Schade und Neemann, 2009; Hartmann, 2003] verwiesen.

²²Zusätzliche Zerlegungen sind zum Beispiel die multiplikative Aufspaltung von \mathbf{F} in mechanische und thermische Anteile, siehe z. B. [Lion, 2000a, S. 11 ff.]. Auch die Berücksichtigung konstitutiver Annahmen kann als Vorlage für die Zerlegungen des Deformationsgradienten dienen und Dekompositionen in elastische und inelastische Anteile implizieren, siehe z. B. [Lee, 1969; Lu und Pister, 1975; Lubliner, 1985; Miehe, 1993; Hartmann, 2003; Quint, 2012; Hamkar, 2013; Rothe, 2015]. Im Gegensatz zur polaren Zerlegung sind die zuletzt genannten multiplikativen Zerlegungen des Deformationsgradienten nicht eindeutig.

²³Solch eine Zerlegung des Deformationsgradienten wird in der einschlägigen Fachliteratur auch als volumetrisch-isochore Zerlegung bezeichnet.

2.1.4 Verzerrungstensoren

Geeignete finite Verzerrungsmaße zur Konzeption von Materialbeziehungen müssen in der Lage sein, nur die von einer Starrkörperbewegung abweichenden Deformationsanteile, welche zu einer Volumen- bzw. Gestaltänderung führen, zu erfassen. Mit den in Abschnitt 2.1.3 eingeführten Strecktensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} bzw. den Cauchy-Green-Tensoren \mathbf{C} und \mathbf{B} gelingt es, die geforderte Eigenschaft zu erfüllen, da infolge der polaren Zerlegung der Rotationsanteil \mathbf{R} im Deformationsgradienten²⁴ von den genannten tensoriellen Größen abgespalten wird. Zudem ist es nützlich, Verzerrungsmaße einzuführen, die für reine Starrkörperbewegungen und die undeformierte Ausgangskonfiguration identisch zu $\mathbf{0}$ verschwinden. Der mit monotonen Eigenschaften ausgestattete Greensche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{U}^2 - \mathbf{1}) \quad (2.34)$$

erfüllt die genannten Bedingungen und agiert wie \mathbf{C} auf dem Tangentialraum der Referenzkonfiguration.²⁵ Die tensorielle Größe $\mathbf{1}$ repräsentiert den Einheitstensor. Außerdem kann das angegebene Dehnungsmaß durch den Verschiebungsgradienten \mathbf{H} dargestellt werden. Unter Berücksichtigung von Gl. (2.27) folgt

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T \mathbf{H}). \quad (2.35)$$

Eine geometrisch anschauliche Interpretation des Greenschen Verzerrungstensors entsteht durch die Differenzenbildung der Quadrate der Linienelemente von Ausgangs- und Momentankonfiguration.²⁶ Es gilt die Identität

$$d\vec{x} \cdot d\vec{x} - d\vec{X} \cdot d\vec{X} = 2 d\vec{X} \cdot \mathbf{E} d\vec{X}. \quad (2.36)$$

Ein weiterer idealer Kandidat zur Angabe von endlichen Verzerrungen ist das räumliche Gegenstück zu \mathbf{E} in der Momentankonfiguration, der sogenannte Almansische Verzerrungstensor

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}), \quad (2.37)$$

welcher analog zum Greenschen Verzerrungstensor durch die Bilinearform

$$d\vec{x} \cdot d\vec{x} - d\vec{X} \cdot d\vec{X} = 2 d\vec{x} \cdot \mathbf{A} d\vec{x} \quad (2.38)$$

²⁴Es ist festzustellen, dass im Fall einer reinen Starrkörperbewegung $\vec{x} = \vec{x}_R(\vec{X}, t) = \mathbf{Q}(t)(\vec{X} - \vec{X}_0) + c(t)$, bestehend aus Translation $c(t)$ und Rotation $\mathbf{Q}(t)(\vec{X} - \vec{X}_0)$, wobei Letztere durch den zeitabhängigen orthogonalen Tensor $\mathbf{Q}(t)$ und den Referenzpunkt \vec{X}_0 beschrieben wird, nur Informationen des Rotationsanteils im Deformationsgradienten \mathbf{F} erhalten bleiben, siehe z. B. [Holzapfel, 2000; Haupt, 2002]. Die Starrkörpertranslation geht aufgrund der Gradientenbildung nicht in die Berechnung von \mathbf{F} ein, d. h. es gilt $\mathbf{F}(\vec{X}, t) = \mathbf{R}(\vec{X}, t) = \mathbf{Q}(t)$.

²⁵Der Faktor ein halb wird für die Verbindung zur Theorie infinitesimaler Verzerrungen, siehe Abschnitt 2.4, eingeführt.

²⁶Eine weitere Interpretation nach Haupt [2002] bedient sich der Betrachtung der finiten Verzerrungsmaße mit Hilfe von konvektiven Koordinaten. In diesem Fall entsprechen die Verzerrungstensoren Differenzen in den Metriktensoren von Momentan- und Referenzkonfiguration.

motiviert werden kann. Die beiden symmetrischen Dehnungsmaße der nichtlinearen Kontinuumsmechanik \mathbf{E} und \mathbf{A} sind mit Hilfe der Transformationsbeziehung²⁷

$$\mathbf{A} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1} \quad (2.39)$$

ineinander überführbar. Im Rahmen der Theorie großer Deformationen sind Verzerrungsmaße niemals eindeutig. Die hier vorgestellten Tensoren zur Messung lokaler Verzerrungen repräsentieren nur eine begrenzte Auswahl. Neben diesen finiten Verzerrungsgrößen existieren eine Vielzahl anderer, deren Eigenschaften sich z. B. nach bestimmten Anforderungen von konstitutiven Gleichungen richten. Obwohl \mathbf{E} und \mathbf{A} sehr gebräuchlich im Bereich der finiten Elastizitätstheorie eingesetzt werden, eignen sie sich jedoch nur für einen moderaten Streck- und Stauchungsbereich. Das logarithmische Dehnungsmaß nach Henky ist eine geeignete Wahl bei sehr großen Verzerrungen, welche z. B. im Bereich der finiten Plastizitätstheorie vorzufinden sind. Eine umfangreichere Darstellung der Verzerrungstensoren im Rahmen der nichtlinearen Kontinuumsmechanik ist [Ogden, 1984; Haupt und Tsakmakis, 1989; Haupt, 2002; Hartmann, 2003] zu entnehmen.

2.1.5 Deformations- und Verzerrungsraten

Für viele zeitabhängige Prozesse ist die Beschreibung der lokalen Deformation durch den Deformationsgradient nicht ausreichend. Ratenabhängige Deformationsgrößen, die die zeitliche Änderung von Linien-, Flächen- und Volumenelementen beschreiben, liefern weitere Informationen. Eine herausragende Rolle spielt hierbei der räumliche Geschwindigkeitsgradient

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \text{grad } \vec{v}(\vec{x}, t), \quad (2.40)$$

der aus der Anwendung des Gradientenoperators in der Momentankonfiguration auf das räumlich dargestellte Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}(\vec{x}, t)$ hervorgeht. Hierbei kennzeichnet $\dot{\mathbf{F}} = \text{Grad } \vec{v}(\vec{X}, t)$ den materiellen Geschwindigkeitsgradienten. Mit Hilfe des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten lassen sich Änderungsgeschwindigkeiten materieller Linien-, Flächen- und Volumenelemente

$$(\dot{d}\vec{x}) = \dot{\mathbf{F}} d\vec{X} = \mathbf{L} d\vec{x}, \quad (2.41)$$

$$(\dot{d}\vec{a}) = ((\text{tr } \mathbf{L}) \mathbf{1} - \mathbf{L}^T) d\vec{A} = ((\text{div } \vec{v}) \mathbf{1} - \mathbf{L}^T) d\vec{A}, \quad (2.42)$$

$$(\dot{d}v) = (\text{tr } \mathbf{L}) dv = (\text{div } \vec{v}) dv \quad (2.43)$$

in der Momentankonfiguration formulieren. In den angegebenen Ausdrücken kennzeichnen $\text{tr } \mathbf{L} = L_{kk}$ ²⁸ die Berechnung der Spur von L und div den Divergenz-Operator bezüglich räumlicher Koordinaten. Zur Vervollständigung der Notation sei an dieser Stelle der Divergenz-Operator Div in der Referenzkonfiguration angeführt. Des Weiteren liefert die eindeutige additive Zerlegung des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (2.44)$$

²⁷Diese Transformationsbeziehungen, welche materielle und räumliche Tensorgrößen miteinander verbinden, werden häufig auch als Vorwärts- bzw. Rückwärtstransformation bezeichnet. In der englischsprachigen Literatur werden die Begriffe Push-Forward-Operation und Pull-Back-Operation verwendet.

²⁸Zur Vereinfachung der Notation wird die Einsteinsche Summationskonvention verwendet.

in einen symmetrischen Anteil $\mathbf{D} = 1/2(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)$ und einen antisymmetrischen Anteil²⁹ $\mathbf{W} = 1/2(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$ einen wesentlichen Beitrag zur geometrischen Interpretation. Der symmetrische Verzerrungsgeschwindigkeits- bzw. Streckgeschwindigkeitstensor \mathbf{D} repräsentiert Änderungsgeschwindigkeiten von Längen und Winkeln materieller Linienelemente in der Momentankonfiguration. Dagegen wird der schiefsymmetrische Anteil \mathbf{W} als Drehgeschwindigkeits- bzw. Wirbeltensor bezeichnet. Der Name leitet sich aus der Anschauung ab, dass \mathbf{W} die Drehgeschwindigkeit angibt, mit der das orthonormale Hauptachsensystem von \mathbf{D} augenblicklich rotiert. Im Gegensatz zur polaren Zerlegung des Deformationsgradienten, siehe Abschnitt 2.1.3, welche eine multiplikative Zerlegung der lokalen Deformation aufzeigt, gilt für den räumlichen Geschwindigkeitsgradienten eine additive Dekomposition in einen Streckungs- und Rotationsanteil. Aufbauend auf diesen Definitionen lassen sich eine Reihe von Verzerrungsraten definieren. Unter Ausnutzung der Identität $\dot{\mathbf{E}} = 1/2\dot{\mathbf{C}} = 1/2(\dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}})$, siehe Gl. (2.34), gilt die Beziehung

$$\dot{\mathbf{E}} = \mathbf{F}^T \mathbf{D} \mathbf{F} \iff \mathbf{D} = \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1}, \quad (2.45)$$

die eine Transformation zwischen der materiellen Zeitableitung des Greenschen Verzerrungstensors \mathbf{E} und dem Verzerrungsgeschwindigkeitstensor³⁰ \mathbf{D} ermöglicht.³¹ Wird die Vorwärtstransformation aus Gl. (2.39) in die soeben hergeleitete Beziehung eingesetzt, führt dies auf den Zusammenhang

$$\mathbf{D} = \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{F}^{-T} \left(\frac{d}{dt} (\mathbf{F}^T \mathbf{A} \mathbf{F}) \right) \mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L} =: \hat{\mathbf{A}}, \quad (2.46)$$

²⁹Ein anti- bzw. schiefsymmetrischer Tensor zweiter Stufe zeichnet sich durch die Eigenschaft $\mathbf{W} = -\mathbf{W}^T$ aus. Zudem kann jedem schiefsymmetrischen Tensor ein sogenannter axialer Vektor \vec{w} zugeordnet werden, sodass für alle $\vec{v} \in \mathbb{V}^3$ die lineare Abbildung $\mathbf{W}\vec{v}$ identisch mit dem gebildeten Kreuzprodukt aus dem axialen Vektor \vec{w} und \vec{v} ist. Es gilt $\mathbf{W}\vec{v} = \vec{w} \times \vec{v}$. In der einschlägigen Fachliteratur wird häufig auch anstatt der Bezeichnung anti- bzw. schiefsymmetrisch der Begriff antimetrisch zur Charakterisierung der Eigenschaft $\mathbf{W} = -\mathbf{W}^T$ verwendet.

³⁰In einigen Monographien, wie z. B. [Altenbach, 2015], wird \mathbf{D} auch als Streckgeschwindigkeitstensor bezeichnet.

³¹Die Transformationsbeziehung in Gl. (2.45)₂ kennzeichnet eine Push-Forward-Operation der auf der Referenzkonfiguration operierenden kovarianten Greenschen Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\mathbf{E}}$ auf den Tensor \mathbf{D} in der Momentankonfiguration. Gl. (2.45)₁ entspricht der zugehörigen Pull-Back-Operation.

der zusätzlich die Äquivalenz zwischen der kovarianten³² Oldroyd-Ableitung $\overset{\Delta}{\mathbf{A}}$ ³³ des Almansischen Verzerrungstensors \mathbf{A} und dem Verzerrungsgeschwindigkeitstensor \mathbf{D} herstellt.³⁴ Der Verzerrungsgeschwindigkeitstensor \mathbf{D} bzw. $\overset{\Delta}{\mathbf{A}}$ kann der Klasse der objektiven Tensoren, siehe Abschnitt 2.5.1, zugeordnet werden.

2.2 Kinetische Größen: Spannung und Wärmefluss

Einhergehend mit der Bewegung bzw. der Deformation eines materiellen Körpers entsteht im Inneren des Kontinuums aufgrund äußerer Belastungen ein Beanspruchungszustand. Der Spannungsbegriff ist von zentraler Bedeutung in der Kontinuumsmechanik zur Charakterisierung des Beanspruchungszustands. Der folgende Abschnitt dient dazu, Spannungstensoren einzuführen, die in der vorliegenden Arbeit Verwendung finden. Abschließend werden die thermischen Beanspruchungsgrößen definiert.

Dem Schnittprinzip von Euler-Cauchy folgend kann jeder innere materielle Punkt durch einen geeignet gewählten Schnitt freigelegt werden. Abbildung 2.3 zeigt die durch einen beliebig geführten Schnitt zugänglich gemachten Beanspruchungsgrößen. Die Kennzeichnung der Schnittfläche in der Momentankonfiguration erfolgt mit $\partial\chi_t[\mathcal{B}]$. Ausgehend von einer auf die aktuelle Begrenzungsfläche des materiellen Körpers aufgetragenen äußeren Last kann auf jedem Flächenelement $d\vec{a} = \vec{n} da$ der Schnittfläche ein infinitesimaler Kraftvektor $d\vec{f}$ sichtbar gemacht werden. Aufgrund des Reaktionsprinzips wirkt auf der gegenüberliegenden Schnittfläche ein differentieller Kraftvektor in entgegengesetzter Richtung. Der Grenzübergang $\vec{t} = \lim_{\Delta a \rightarrow 0} \Delta \vec{f} / \Delta a$ führt auf die Definition des Cauchyschen Spannungsvektors \vec{t} bzw. ausgedrückt in Form eines Differentials auf

$$d\vec{f} = \vec{t} da. \quad (2.47)$$

Die alternative Bezeichnung von \vec{t} als wahrer Spannungsvektor leitet sich von der charakteristischen Eigenschaft ab, dass der Cauchysche Spannungsvektor \vec{t} den differentiellen Kraftvektor $d\vec{f}$ auf die aktuelle Fläche da in der Momentankonfiguration bezieht. Im

³²Die Grundlage für die Darstellung eines Tensors beliebiger Stufe in Form einer kovarianten bzw. kontravarianten Darstellung bildet die Definition eines beliebigen linear unabhängigen Basissystems (kovariante Basis) und dessen zugehörige Dualbasis (kontravariante Basis), siehe z. B. [Klingbeil, 1966; Schade und Neemann, 2009]. Eine Möglichkeit der Definition, welche zugleich eine sehr anschauliche Interpretation aller bisher eingeführten Deformationsmaße ermöglicht, ist die Parametrisierung der Referenz- und Momentankonfiguration durch die Wahl von konvektiven Koordinaten, siehe [Haupt, 2002; Wriggers, 2008]. Hierbei werden materielle Linien in der Referenzkonfiguration und deren Abbildung in der Momentankonfiguration, die durch eine einheitliche krummlinige Koordinatenparametrisierung beschrieben werden können, als Ausgangspunkt für die Definition von Tangenten- und Gradientenvektoren in den beiden Konfigurationen gewählt. Im Rahmen dieser Betrachtung entspricht das aus den Tangentenvektoren gebildete Basissystem der kovarianten Basis. Die Gradientenvektoren definieren die zugeordnete kontravariante Dualbasis.

³³Objektive Zeitableitungen spielen eine große Rolle bei der Formulierung von Materialbeziehungen. Neben der Oldroyd-Ableitung existieren eine Vielzahl weiterer objektiver Zeitableitungen, die jedoch vorrangig im Zusammenhang mit objektiven Spannungsraten Erwähnung finden.

³⁴Holzapfel [2000] und Wriggers [2008] folgend kann alternativ die Beziehung $\overset{\Delta}{\mathbf{A}} = \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1}$ über das Konzept der Lie-Ableitung angegeben werden. Daher ist die Lie-Ableitung identisch mit der Oldroyd-Ableitung.

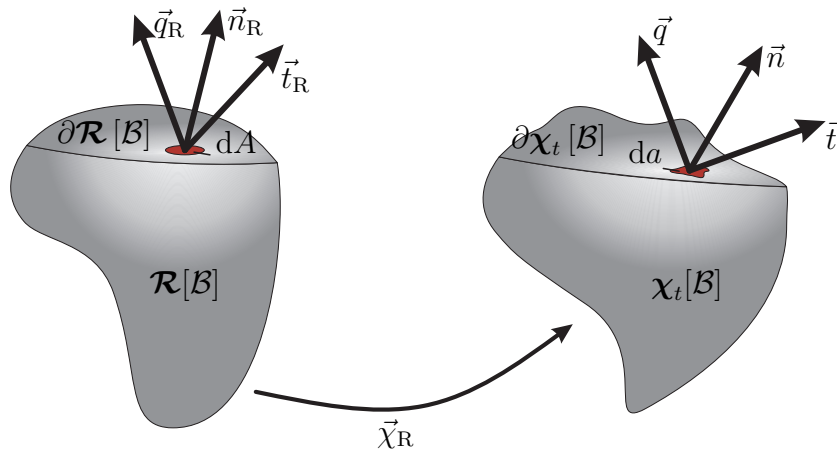


Abbildung 2.3: Spannungs- und Wärmestromvektor

Allgemeinen hängt \vec{t} vom Ort \vec{x} , der Zeit t und der Orientierung \vec{n} ³⁵ des Flächenelements $d\vec{a} = \vec{n} da$ ab.³⁶ Die zuletzt genannte Eigenschaft des Spannungsvektors ist mit dem Cauchy-Theorem

$$\vec{t}(\vec{x}, t, \vec{n}) = \mathbf{T}(\vec{x}, t) \vec{n}(\vec{x}, t) \quad (2.48)$$

verbunden, welches eine lineare Abbildung zwischen dem Cauchyschen Spannungstensor³⁷ \mathbf{T} im materiellen Punkt $\vec{x} \in \partial\chi_t[\mathcal{B}]$ und dem Normaleneinheitsvektor \vec{n} postuliert. Der Cauchysche Spannungstensor \mathbf{T} ist unabhängig von \vec{n} und beschreibt daher vollständig den Spannungszustand im Punkt \vec{x} . Das Lemma von Cauchy folgt unmittelbar aus Gleichgewichtsbetrachtungen an einem infinitesimalen Tetraedervolumenelement und dient als Fundament des bereits oben erwähnten Reaktionsprinzips in der Form $\vec{t}(\vec{x}, t, \vec{n}) = -\vec{t}(\vec{x}, t, -\vec{n})$, siehe z. B. [Altenbach, 2015; Helm, 2003].³⁸ Die alternative Deklaration von \mathbf{T} als wahrer Spannungstensor ist auf den Sachverhalt zurückzuführen, dass die in der Momentankonfiguration wirkenden Spannungen auf das orientierte Flächenelement derselben Konfiguration bezogen werden. Neben \mathbf{T} ist oftmals bei der Formulierung von Materialbeziehungen der Kirchhoffsche Spannungstensor

$$\mathbf{S} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{T} \quad (2.49)$$

anzutreffen, der aus einer Gewichtung des Cauchyschen Spannungstensors mit $\det \mathbf{F}$ hervorgeht.³⁹

In Analogie zu den in Abschnitt 2.1.3 und in Abschnitt 2.1.4 vorgestellten Deformations- und Verzerrungsgrößen lassen sich Spannungen auch in Form von Zweipunkt-Tensoren,

³⁵Der nach außen gerichtete Normaleneinheitsvektor der Schnittfläche im Punkt $\vec{x} \in \partial\chi_t[\mathcal{B}]$ wird durch \vec{n} markiert.

³⁶Fällt die Schnittfläche mit der Oberfläche des materiellen Körpers zusammen, entsprechen die Spannungsvektoren den infolge einer aufgebrachten äußeren Belastung resultierenden Oberflächenspannungen.

³⁷Der Cauchysche Spannungstensor ist symmetrisch, siehe Abschnitt 2.3.3.

³⁸Das Reaktionsprinzip sagt aus, dass Spannungsvektoren im Punkt \vec{x} gegenüberliegender Schnittflächen entgegengesetzt orientiert sind.

³⁹Der symmetrische Kirchhoffsche Spannungstensor \mathbf{S} trägt auch die Bezeichnung gewichteter Cauchy-Tensor.

bei denen sich nur das Flächenelement auf die Referenzkonfiguration bezieht, oder als eine vollständig auf der Referenzkonfiguration operierende Spannungsgröße darstellen. Wird der aktuelle differentielle Kraftvektor $d\vec{f}$ auf ein Oberflächenelement $d\vec{A} = \vec{n}_R dA$ der Schnittfläche $\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ in der Ausgangskonfiguration bezogen, resultieren Nennspannungsmaße⁴⁰ in Form des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungsvektors \vec{t}_R und des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors \mathbf{T}_R :

$$d\vec{f} = \vec{t}_R dA = \mathbf{T}_R d\vec{A} = \mathbf{T}_R \vec{n}_R dA \iff \vec{t}_R = \mathbf{T}_R \vec{n}_R \quad (2.50)$$

Der Normaleneinheitsvektor \vec{n}_R symbolisiert die Orientierung des Flächenelements $d\vec{A} = \vec{n}_R dA$ in der Referenzkonfiguration. Unter Ausnutzung der Gleichungen (2.23), (2.48) und (2.50) sowie der offensichtlich vorliegenden Parallelität zwischen \vec{t} und \vec{t}_R , infolge

$$d\vec{f} = \vec{t} da = \vec{t}_R dA, \quad (2.51)$$

lässt sich die Transformationsbeziehung

$$\mathbf{T}_R = (\det \mathbf{F}) \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} \quad (2.52)$$

angeben, welche \mathbf{T} und \mathbf{T}_R ⁴¹ ineinander überführt. Ein vollständig auf der Referenzkonfiguration operierender Tensor⁴² führt auf die Definition

$$\tilde{\mathbf{T}} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T}_R \quad (2.53)$$

des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors.⁴³ Wie bereits angedeutet, können die eingeführten Spannungstensoren über Transformationen ineinander umgerechnet werden. Tabelle 2.1 fasst diese Beziehungen zusammen.

Die zu den Spannungen affine thermische Beanspruchungsgröße ist der Wärmefluss q . Ausgehend von einem Energietransport in der aktuellen Konfiguration gelingt die Definition des wahren bzw. Cauchyschen Wärmeflussvektors

$$q(\vec{x}, t, \vec{n}) = -\vec{q}(\vec{x}, t) \cdot \vec{n}(\vec{x}, t), \quad (2.54)$$

wobei das Cauchy Lemma in Form einer linearen Abbildung zwischen \vec{n} und dem Wärmeflussvektor \vec{q} auch für den Wärmefluss q Gültigkeit besitzt. Das Minuszeichen entstammt der Konvention, dass ein positiver Wärmefluss vom materiellen Körper absorbiert wird. Der Bezug des Wärmeflusses auf die Referenzkonfiguration unter Zuhilfenahme von Gl. (2.23) und der Äquivalenzaussage

$$q da = -\vec{q} \cdot \vec{n} da = q_R dA = -\vec{q}_R \cdot \vec{n}_R dA \quad (2.55)$$

⁴⁰Bei Nennspannungen oder auch technischen Spannungen wird die aktuelle Kraft auf ein Flächenelement in der Referenzkonfiguration bezogen.

⁴¹Der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor \mathbf{T}_R ist im Allgemeinen ein antisymmetrischer Tensor und gehört zu der Familie der Zweipunkt-Tensoren.

⁴²Sowohl der differentielle Kraftvektor als auch das orientierte Flächenelement werden auf die Ausgangskonfiguration bezogen. Die resultierenden Spannungsmaße tragen auch die Bezeichnung Pseudospannungsgrößen, da sie keine direkte physikalische Interpretation haben.

⁴³Aus der Symmetrie von \mathbf{T} , siehe nachfolgenden Abschnitt 2.3.3, folgt die Symmetrie von $\tilde{\mathbf{T}}$.

Tabelle 2.1: Transformationstabelle der verwendeten Spannungen: erste Piola-Kirchhoff Spannung \mathbf{T}_R , zweite Piola-Kirchhoff Spannung $\tilde{\mathbf{T}}$, Kirchhoff Spannung \mathbf{S} , Cauchy Spannung \mathbf{T}

	\mathbf{T}_R	$\tilde{\mathbf{T}}$	\mathbf{S}	\mathbf{T}
\mathbf{T}_R		$\mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}}$	$\mathbf{S}\mathbf{F}^{-T}$	$(\det \mathbf{F})\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T}$
$\tilde{\mathbf{T}}$	$\mathbf{F}^{-1}\mathbf{T}_R$		$\mathbf{F}^{-1}\mathbf{S}\mathbf{F}^{-T}$	$(\det \mathbf{F})\mathbf{F}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T}$
\mathbf{S}	$\mathbf{T}_R\mathbf{F}^T$	$\mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}}\mathbf{F}^T$		$(\det \mathbf{F})\mathbf{T}$
\mathbf{T}	$\frac{1}{\det \mathbf{F}}\mathbf{T}_R\mathbf{F}^T$	$\frac{1}{\det \mathbf{F}}\mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}}\mathbf{F}^T$	$\frac{1}{\det \mathbf{F}}\mathbf{S}$	

führt auf die Definitionen des Piola-Kirchhoffschen Wärmeflussvektors

$$\vec{q}_R = (\det \mathbf{F})\mathbf{F}^{-1}\vec{q} \quad (2.56)$$

und des auf die Ausgangsfläche bezogenen Wärmestroms

$$q_R(\vec{X}, t, \vec{n}_R) = -\vec{q}_R(\vec{X}, t) \cdot \vec{n}_R(\vec{X}, t). \quad (2.57)$$

2.3 Bilanzgleichungen der Thermomechanik

Neben der Kinematik zur Beschreibung finiter Verzerrungen und den kinetischen Größen wie Spannungen und Wärmeflüsse aus den vorhergehenden Abschnitten werden thermomechanische Systeme durch die Bilanzgleichungen⁴⁴ für Masse, Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie charakterisiert. Bilanzgleichungen „bilanzieren“ die zeitliche Änderung einer dem Körper zugeordneten physikalischen Größe⁴⁵ $\vec{G}(\mathcal{B}, t)$ bzw. $G(\mathcal{B}, t)$ unter Berücksichtigung der Einwirkung der Umgebung auf den materiellen Körper \mathcal{B} . Sie beschreiben die Interaktion der äußeren Umgebung mit dem materiellen Körper und schlagen dabei eine Verbindung zwischen externen Belastungen⁴⁶ und der physikalischen Größe. Eine Grundannahme bei der Formulierung der axiomatisch eingeführten Bilanzgleichungen ist die Gültigkeit des Schnittprinzips, siehe z. B. [Szabó, 1996], mit dessen Hilfe ein beliebiger materieller Körper aus einem zusammenhängenden Kontinuum herausgeschnitten und

⁴⁴Bilanzgleichungen sind universelle Naturgesetze, die für alle Prozesse unabhängig von den speziellen Eigenschaften des zugrunde liegenden Kontinuums Gültigkeit besitzen.

⁴⁵In den folgenden Ausführungen werden lediglich allgemeine Bilanzaussagen für eine vektorielle physikalische Größe $\vec{G}(\mathcal{B}, t)$ formuliert. Diese können jedoch ohne Probleme auf tensorielle Größen beliebiger Stufe erweitert werden. Ferner wird der Fokus ausschließlich auf die Formulierung der Beziehungen bezüglich eines Inertialsystems gelegt. Darstellungen der Bilanzgleichungen bezogen auf ein bewegtes Bezugssystem sind in der vorliegenden Arbeit nicht von Interesse.

⁴⁶Die Zustandsänderung, welche durch die Änderung der physikalischen Größe beschrieben wird, kann durch externe Belastungen, z. B. in Form von mechanischen Kräften und Momenten oder einer Temperatureinwirkung, verursacht werden.

von seiner Umgebung getrennt wird. Durch Herausschneiden des Körpers aus seiner Umgebung werden volumen- als auch oberflächenverteilte Transportgrößen offengelegt, die den Einfluss der äußeren Umgebung auf den materiellen Körper symbolisieren.⁴⁷ Die den Zustand des materiellen Körpers charakterisierende physikalische Bilanzgröße $\vec{G}(\mathcal{B}, t)$ hat additiven⁴⁸ Charakter und wird daher durch Volumenintegrale von Dichteverteilungen beschrieben, siehe [Haupt, 2002, Kap. 2]. Hierbei kann die Integration im Raum über einen materiellen Körper \mathcal{B} einerseits in der Referenzkonfiguration $\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ bzw. andererseits in der Momentankonfiguration $\chi_t[\mathcal{B}]$ durchgeführt werden.⁴⁹ Für eine beliebige physikalische Größe $\vec{G}(\mathcal{B}, t)$, welche einen Teilzustand des makroskopischen Systems charakterisiert, bedeutet dies

$$\vec{G}(\mathcal{B}, t) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{\psi}_{\mathcal{R}}(\vec{X}, t) dV = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \vec{\psi}(\vec{x}, t) dv. \quad (2.58)$$

Die auf eine Volumeneinheit bezogenen Dichtefunktionen $\vec{\psi}_{\mathcal{R}}$ und $\vec{\psi}$ in der Referenz- und Momentankonfiguration sind über die Bewegung (2.4) und die Transformation materieller Volumenelemente, siehe Gl. (2.25), ineinander überführbar. Werden die genannten Beziehungen mit Gl. (2.58) fusioniert, ergibt sich

$$\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \vec{\psi} dv = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \overbrace{\vec{\psi}}^{\vec{\psi}_{\mathcal{R}}} \det \mathbf{F} dV \quad \Leftrightarrow \quad \vec{\psi}_{\mathcal{R}}(\vec{X}, t) = \vec{\psi}(\vec{x}, t) \det \mathbf{F}. \quad (2.59)$$

Die volumen- und oberflächenverteilten Transportgrößen lassen sich vergleichbar durch Volumen- bzw. Oberflächenintegrale entsprechender Dichteverteilungen darstellen. In mathematischer Form postulieren diese Naturgesetze ein Gleichgewicht zwischen der zeitlichen Änderung (Änderungsgeschwindigkeit) von $\vec{G}(\mathcal{B}, t)$ (ausgedrückt durch die materielle Zeitableitung von $\vec{G}(\mathcal{B}, t)$) und den volumen- und oberflächenverteilten Transportgrößen. Die allgemeinen globalen Bilanzgleichungen lassen sich sowohl in materieller

⁴⁷Das abstrakte Konzept des Freischneidens stellt aus einer physikalischen Anschauung heraus sicher, dass jeder beliebige Teilbereich eines materiellen Körpers (Kontinuums) selbst wieder einen materiellen Körper darstellt.

⁴⁸Zustandsvariablen können in intensive und extensive Größen klassifiziert werden. Intensive Größen, wie z. B. die Temperatur, sind unabhängig von der Stoffmenge und bleiben bei einer Teilung des materiellen Körpers konstant. Dagegen werden zur Stoffmenge proportionale Größen des materiellen Körpers unter dem Begriff extensiv (additiv) zusammengefasst. Hierzu zählen z. B. die Zustandsgrößen Masse, Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie.

⁴⁹ $\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ und $\chi_t[\mathcal{B}]$ bezeichnen hier Integrationsgebiete in der Referenz- bzw. Momentankonfiguration über das Volumen eines materiellen Körpers \mathcal{B} .

Darstellung

$$\begin{aligned}\dot{\vec{G}}(\mathcal{B}, t) &= \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{\psi}_R(\vec{X}, t) dV \\ &= \overbrace{\int_{\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \Phi_R(\vec{X}, t) \vec{n}_R(\vec{X}, t) dA}^{\vec{F}(\mathcal{B}, t)} + \overbrace{\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\vec{\sigma}_R(\vec{X}, t) + \vec{\pi}_R(\vec{X}, t)) dV}^{\vec{S}(\mathcal{B}, t) + \vec{P}(\mathcal{B}, t)},\end{aligned}\quad (2.60)$$

als auch in räumlicher Darstellung

$$\begin{aligned}\dot{\vec{G}}(\mathcal{B}, t) &= \frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \vec{\psi}(\vec{x}, t) dv \\ &= \overbrace{\int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} \Phi(\vec{x}, t) \vec{n}(\vec{x}, t) da}^{\vec{F}(\mathcal{B}, t)} + \overbrace{\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{\sigma}(\vec{x}, t) + \vec{\pi}(\vec{x}, t)) dv}^{\vec{S}(\mathcal{B}, t) + \vec{P}(\mathcal{B}, t)}\end{aligned}\quad (2.61)$$

formulieren. Hierbei kennzeichnen $\vec{\sigma}_R$ bzw. $\vec{\pi}_R$ in der Referenzkonfiguration und $\vec{\sigma}$ bzw. $\vec{\pi}$ in der Momentankonfiguration volumenhaft verteilte Dichtefunktionen, die den integralen Zuführungs- $\vec{S}(\mathcal{B}, t)$ und Produktionsterm $\vec{P}(\mathcal{B}, t)$ erzeugen.⁵⁰ Der Fluss $\vec{F}(\mathcal{B}, t)$ durch die Oberfläche $\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ in der Referenz- bzw. $\partial\chi_t[\mathcal{B}]$ in der Momentankonfiguration wird mit Hilfe des Cauchy Lemmas, siehe Gleichungen (2.48), (2.50) und (2.54), durch die Ausdrücke $\Phi_R \vec{n}_R$ bzw. $\Phi \vec{n}$, welche Oberflächendichtefunktionen symbolisieren, ausgedrückt.⁵¹ Die integralen Bilanzaussagen (2.60) und (2.61) lassen sich unter Berücksichtigung entsprechender Stetigkeitsanforderungen und Anwendung des Gaußschen Integralsatzes⁵² auf die Oberflächenintegrale in eine allgemeine lokale Form, welche für jeden Teilkörper gilt, überführen.⁵³ Die allgemeinen lokalen Bilanzgleichungen, ausgedrückt

⁵⁰Die Volumendichten quantifizieren die Generierung (Quellen) bzw. die Abnahme (Senken) der Bilanzgröße aufgrund einer durch Fernwirkung verursachten Zufuhrdichte bzw. einer Produktionsdichte, siehe [Altenbach, 2015].

⁵¹Die allgemeinen Bilanzgleichungen in diesem Abschnitt entsprechen vektorwertigen Gleichungen, da von einer vektorwertigen physikalischen Größe \vec{G} ausgegangen wird. Analog kann eine allgemeine Form der Bilanzgleichung für skalarwertige Funktionen ψ_R bzw. ψ , σ_R bzw. σ , π_R bzw. π in Verbindung mit einem Vektorfeld $\vec{\Phi}_R$ bzw. $\vec{\Phi}$ aufgestellt werden. Die Erweiterung auf tensorielle Felder beliebiger Stufe ist ebenso möglich. Lediglich der Verjüngungsoperator für das Cauchy Lemma variiert.

⁵²Der Gaußsche Integralsatz bzw. das sogenannte Divergenztheorem lautet:

$$\int_{\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \Phi_R \vec{n}_R dA = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \text{Div } \Phi_R dV \quad \text{bzw.} \quad \int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} \Phi \vec{n} da = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \text{div } \Phi dv \quad (2.62)$$

⁵³Die Übertragung des Schnittprinzips auf infinitesimale Volumenelemente des betrachteten Kontinuums führt auf die lokalen Bilanzgleichungen. Unter der Annahme kontinuierlich stetiger Integranden in Bezug auf \vec{X} und \vec{x} müssen die Integranden innerhalb des gesamten Integrationsbereichs verschwinden. Damit stellt die lokale Formulierung ein System von partiellen Differentialgleichungen dar.

mit Größen in der Referenzkonfiguration,⁵⁴ lauten

$$\frac{d\vec{\psi}_R(\vec{X}, t)}{dt} = \text{Div } \Phi_R(\vec{X}, t) + \vec{\sigma}_R(\vec{X}, t) + \vec{\pi}_R(\vec{X}, t) \quad (2.63)$$

und die räumliche Darstellung führt auf die allgemeine lokale Form

$$\frac{d\vec{\psi}(\vec{x}, t)}{dt} + \vec{\psi}(\vec{x}, t) \text{div } \vec{v}(\vec{x}, t) = \text{div } \Phi(\vec{x}, t) + \vec{\sigma}(\vec{x}, t) + \vec{\pi}(\vec{x}, t), \quad (2.64)$$

wobei hier aufgrund des zeitabhängigen Integrationsgebiets das Reynoldssche Transporttheorem⁵⁵ Anwendung findet.

2.3.1 Massenbilanz

Die Masse $m(\mathcal{B}, t)$ eines materiellen Körpers \mathcal{B} ist ein charakteristisches Maß zur Beschreibung der Trägheit, also dem Widerstand den ein materieller Körper seiner Bewegungsänderung entgegensetzt. Darüber hinaus ist sie ein Maß zur Quantifizierung der Gravitationskraft, welcher ein materieller Körper in einem Gravitationsfeld ausgesetzt ist. Die positive skalarwertige Größe für einen materiellen Körper $m(\mathcal{B}, t) > 0$ ist für einen Zeitpunkt t definiert als das Volumenintegral

$$m(\mathcal{B}, t) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R(\vec{X}, t) dV = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho(\vec{x}, t) dv, \quad (2.66)$$

wobei jedem materiellen Punkt die positive Massendichte ϱ_R in der Referenzkonfiguration bzw. die positive Massendichte ϱ in einer räumlichen Darstellung zugeordnet werden kann.

⁵⁴In der materiellen Darstellung können aufgrund der zeitunabhängigen Referenzkonfiguration Integration und Differentiation vertauscht werden. Es gilt:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{\psi}_R(\vec{X}, t) dV = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \frac{d\vec{\psi}_R(\vec{X}, t)}{dt} dV = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \frac{\partial \vec{\psi}_R(\vec{X}, t)}{\partial t} dV$$

⁵⁵Das Bilden der materiellen Zeitableitung von $\frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \vec{\psi}(\vec{x}, t) dv$ mit einem zeitabhängigen Integrationsbereich führt auf

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \vec{\psi} dv &= \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \left(\dot{\vec{\psi}} \det \mathbf{F} + \vec{\psi} (\det \mathbf{F})' \right) dV = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \left(\frac{d\vec{\psi}}{dt} + \vec{\psi} \text{div } \vec{v} \right) dv \\ &= \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \left(\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} + \text{div}(\vec{\psi} \otimes \vec{v}) \right) dv = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} dv + \int_{\partial \chi_t[\mathcal{B}]} ((\vec{v} \cdot \vec{n}) \vec{\psi}) da. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Hierbei wird das Integral unter Ausnutzung der Beziehung (2.25) zurück in die Referenzkonfiguration transformiert. Des Weiteren ist von der Änderungsgeschwindigkeit materieller Volumenelemente in Gl. (2.43) zur Berechnung der materiellen Ableitung $(\det \mathbf{F})' = \det \mathbf{F} \text{div } \vec{v}$ sowie von $d\vec{\psi}/dt + \vec{\psi} \text{div } \vec{v} = \partial \vec{\psi} / \partial t + \text{div}(\vec{\psi} \otimes \vec{v})$, vgl. mit Gl. (2.12), Gebrauch gemacht worden. Die angegebenen Umformungen in Gl. (2.65) werden in der Literatur, siehe z. B. [Haupt, 2002, S. 132–134], als Reynoldssches Transporttheorem bezeichnet.

Die Massenbilanz, dargestellt in der globalen Formulierung, entspricht dem Sonderfall eines Erhaltungssatzes, da sie die zeitliche Erhaltung der Masse in der Form

$$\frac{d}{dt} m(\mathcal{B}, t) = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) dV = \frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho(\vec{x}, t) dv = 0 \quad (2.67)$$

fordert, d. h. $m(\mathcal{B}, t) = m(\mathcal{B})$. Die lokale Formulierung in materieller Darstellung

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) = 0 \iff \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) = \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) \quad (2.68)$$

führt auf die Aussage einer zeitlich konstanten Massendichte $\varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X})$ in der Referenzkonfiguration. Für die lokale Massenbilanz in der Eulerschen Darstellung unter Ausnutzung des Reynoldsschen Transporttheorems (2.65) ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \varrho(\vec{x}, t) + \varrho(\vec{x}, t) \operatorname{div} \vec{v}(\vec{x}, t) = 0 \iff \frac{\partial \varrho(\vec{x}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} (\varrho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t)) = 0, \quad (2.69)$$

wobei zur Definition des zweiten Ausdrucks die materielle Zeitableitung für eine räumliche Feldbeschreibung, siehe Gl. (2.15), und die Produktregel Anwendung finden.⁵⁶ Die beiden Dichteverteilungen korrelieren über die Beziehung

$$\varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) = \varrho(\vec{x}, t) \det \mathbf{F}. \quad (2.70)$$

Abschließend sei noch eine interessante Eigenschaft der Massenbilanz angeführt, die mit dem Bilden der materiellen Zeitableitung eines Volumenintegrals der Form

$$\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} w(\vec{x}, t) \varrho(\vec{x}, t) dv$$

zusammenhängt. Hierbei repräsentiert $w(\vec{x}, t)$ eine beliebige physikalische Feldgröße pro Masseneinheit in der Momentankonfiguration. Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} w(\vec{x}, t) \varrho(\vec{x}, t) dv &= \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} w(\vec{X}, t) \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) dV \\ &= \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \frac{\partial w(\vec{X}, t)}{\partial t} \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) dV = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \dot{w}(\vec{x}, t) \varrho(\vec{x}, t) dv \end{aligned} \quad (2.71)$$

Demnach kann als Konsequenz der Massenerhaltung (2.68) beim Bilden der materiellen Zeitableitung die zeitliche Abhängigkeit der Dichte $\varrho(\vec{x}, t)$ außer Acht gelassen werden.⁵⁷ Das angegebene Endresultat wird in den folgenden Abschnitten kontinuierlich angewendet.

Zur Verdichtung der Schreibweise wird im Folgenden an Stellen, bei denen sich die Lagrangesche bzw. die Eulersche Betrachtungsweise aus dem Kontext erschließt, auf eine Auflistung der abhängigen Größen verzichtet.

⁵⁶Es gilt

$$\frac{d}{dt} \varrho + \varrho \operatorname{div} \vec{v} = \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \operatorname{grad} \varrho \cdot \vec{v} + \varrho \operatorname{div} \vec{v} = \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \operatorname{div} (\varrho \vec{v}).$$

⁵⁷Alternativ kann die Zeitableitung des Volumenintegrals mit Hilfe des Reynoldsschen Transporttheorems (2.65) und der lokalen Massenbilanz (2.69) in die angegebene Form überführt werden.

2.3.2 Impulsbilanz

Im Rahmen der Kontinuumsmechanik verkörpert der Impulsvektor $\vec{I}(\mathcal{B}, t)$ ein fundamentales Maß zur Charakterisierung des kinetischen Zustands eines materiellen Körpers und ist definiert als das Volumenintegral

$$\vec{I}(\mathcal{B}, t) = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) \vec{v}(\vec{X}, t) dV = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t) dv. \quad (2.72)$$

Die extensive Größe schlägt somit eine Verbindung zwischen dem Geschwindigkeitsfeld und der Massenverteilung eines materiellen Körpers. Die globale Form der Impulsbilanz⁵⁸ in materieller Darstellung

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) \vec{v}(\vec{X}, t) dV = \int_{\partial \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \overbrace{\mathbf{T}_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) \vec{n}_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t)}^{\vec{t}_{\mathbf{R}}} dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) \vec{k}(\vec{X}, t) dV \quad (2.73)$$

und in räumlicher Darstellung

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t) dv = \int_{\partial \chi_t[\mathcal{B}]} \overbrace{\mathbf{T}(\vec{x}, t) \vec{n}(\vec{x}, t)}^{\vec{t}} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho(\vec{x}, t) \vec{k}(\vec{x}, t) dv \quad (2.74)$$

ergibt sich aus der Forderung

$$\frac{d}{dt} \vec{I}(\mathcal{B}, t) = \vec{F}_{\mathbf{r}}(\mathcal{B}, t), \quad (2.75)$$

mit der resultierenden Kraft

$$\vec{F}_{\mathbf{r}}(\mathcal{B}, t) = \int_{\partial \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{t}_{\mathbf{R}} \vec{n}_{\mathbf{R}} dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathbf{R}} \vec{k} dV \quad (2.76)$$

bzw.

$$\vec{F}_{\mathbf{r}}(\mathcal{B}, t) = \int_{\partial \chi_t[\mathcal{B}]} \vec{t} \vec{n} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho \vec{k} dv. \quad (2.77)$$

Damit drückt Gl. (2.75) ein Gleichgewicht zwischen der materiellen Zeitableitung des Impulsvektors $d\vec{I}/dt$ und der von außen angreifenden Kräfte, welche sich aus oberflächenverteilten Spannungsvektoren $\vec{t} = \mathbf{T}\vec{n}$ (siehe Cauchysches Lemma (2.48)) bzw. $\vec{t}_{\mathbf{R}} = \mathbf{T}_{\mathbf{R}}\vec{n}_{\mathbf{R}}$ (siehe Cauchysches Lemma Gl. (2.50)), und einer volumenverteilten Kraftdichte $\varrho_{\mathbf{R}}\vec{k}$ bzw. $\varrho\vec{k}$ ⁵⁹ zusammensetzen und in der resultierenden Kraft $\vec{F}_{\mathbf{r}}(\mathcal{B}, t)$ konzentriert werden,

⁵⁸Alternative Darstellungen der Impulsbilanz, wie z. B. den Massenmittelpunktsatz, sind in [Haupt, 2002; Helm, 2003; Altenbach, 2015] zu finden.

⁵⁹Die Größe \vec{k} selbst symbolisiert eine Kraftdichte pro Masseneinheit (Einheitsmasse), z. B. die Erdbeschleunigung. Einige Autoren, siehe z. B. [Altenbach, 2015], verwenden eine gesonderte Notation zur Kennzeichnung von massenbezogenen Dichteverteilungen in der Referenzkonfiguration. Aufgrund der Massenbilanzaussage (2.70) und der Transformationsbeziehung (2.25) gilt $\vec{k} = \vec{k}(\vec{x}, t) = \vec{k}(\chi_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t), t) = \vec{k}(\vec{X}, t)$, sodass auf eine separate Kennzeichnung der materiellen Größen verzichtet wird. Dagegen muss im Fall von Dichteverteilungen, welche sich auf eine Volumeneinheit beziehen, in Analogie zu Gl. (2.59)₂ eine Unterscheidung von Größen in der Momentan- und Referenzkonfiguration erfolgen. In dieser Arbeit findet vorzugsweise die erste Variante zur Darstellung von Dichteverteilungen Anwendung.

aus. Die resultierenden Oberflächen- und Volumenkräfte repräsentieren den Einfluss der Umgebung auf den materiellen Körper und führen infolgedessen eine Bewegungsänderung herbei. Unter Einbeziehung des Divergenztheorems (2.62)₁ und des Resultats (2.68) für die Massenerhaltung folgt die lokale Impulsbilanz in materieller Darstellung

$$\varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X})\dot{\vec{v}}(\vec{X}, t) = \text{Div } \mathbf{T}_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) + \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X})\vec{k}(\vec{X}, t). \quad (2.78)$$

Hierbei kennzeichnet die materielle Zeitableitung $\dot{\vec{v}}(\vec{X}, t)$ den in Gl. (2.16) definierten Beschleunigungsvektor $\vec{a}(\vec{X}, t)$. Die analoge Vorgehensweise, d. h. die Kombination des Reynoldsschen Transporttheorems (2.65), des Gaußschen Integralsatzes (2.62)₂ und der lokalen Massenerhaltung (2.69), führt auf die Ratenformulierung

$$\varrho\dot{\vec{v}} = \text{div } \mathbf{T} + \varrho\vec{k} \iff \varrho\left(\frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + [\text{grad } \vec{v}] \vec{v}\right) = \text{div } \mathbf{T} + \varrho\vec{k} \quad (2.79)$$

in räumlicher Darstellung.

2.3.3 Drehimpulsbilanz

Der Drehimpulsvektor $\vec{D}_{\vec{c}}$ des materiellen Körpers \mathcal{B} , bezogen auf einen beliebigen raumfesten Punkt \vec{c} ist definiert als das Volumenintegral

$$\begin{aligned} \vec{D}_{\vec{c}}(\mathcal{B}, t) &= \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \left(\vec{\chi}_{\mathbf{R}}(\vec{X}, t) - \vec{c} \right) \times \vec{v}(\vec{X}, t) \varrho_{\mathbf{R}}(\vec{X}) dV \\ &= \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{v}(\vec{x}, t) \varrho(\vec{x}, t) dv. \end{aligned} \quad (2.80)$$

In einer kongruenten Aussage zur Impulsbilanz stellt die globale Drehimpulsbilanz

$$\frac{d}{dt} \vec{D}_{\vec{c}}(\mathcal{B}, t) = \vec{M}_{\vec{c}}(\mathcal{B}, t) \quad (2.81)$$

die Gleichheit zwischen der zeitlichen Änderung von $\vec{D}_{\vec{c}}$ und dem von außen angreifenden resultierenden Moment

$$\vec{M}_{\vec{c}}(\mathcal{B}, t) = \int_{\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\vec{\chi}_{\mathbf{R}} - \vec{c}) \times \vec{t}_{\mathbf{R}} dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\vec{\chi}_{\mathbf{R}} - \vec{c}) \times \vec{k} \varrho_{\mathbf{R}} dV \quad (2.82)$$

bzw.

$$\vec{M}_{\vec{c}}(\mathcal{B}, t) = \int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{t} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{k} \varrho dv, \quad (2.83)$$

welches aus Momentenbeiträgen der oberflächen- und volumenverteilten Kraftdichten bezogen auf den Bezugspunkt \vec{c} resultiert, her. Nach Substitution der Gl. (2.80)₁ und (2.82)

in Gl. (2.81) bzw. der Gl. (2.80)₂ und (2.83) in Gl. (2.81) nimmt die Drehimpulsbilanz in materieller Darstellung die Form

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\vec{\chi}_R - \vec{c}) \times \vec{v}_{\mathcal{Q}R} dV = \int_{\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\vec{\chi}_R - \vec{c}) \times \vec{t}_R dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\vec{\chi}_R - \vec{c}) \times \vec{k}_{\mathcal{Q}R} dV \quad (2.84)$$

und in der Eulerschen Darstellung die Gestalt

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{v}_{\mathcal{Q}} dv = \int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{t} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{k}_{\mathcal{Q}} dv \quad (2.85)$$

an. Ohne Angabe der vollständigen Herleitung, siehe hierzu [Helm, 2003, S. 168–169] und [Haupt, 2002, S. 99–100], kann Gl. (2.85) unter Verwendung einer allgemeinen kovarianten Basis⁶⁰ in die folgende Darstellung⁶¹

$$\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{x} - \vec{c}) \times \overbrace{\left(\dot{\vec{v}} - \operatorname{div} \mathbf{T} - \varrho \vec{k} \right)}^{\vec{0}} dv = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} T^{ij} \vec{g}_i \times \vec{g}_j dv \quad (2.86)$$

überführt werden. Die offensichtliche Vereinfachung mit Hilfe der lokalen Impulsbilanz (2.79) führt auf

$$\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} T^{ij} \vec{g}_i \times \vec{g}_j dv = \vec{0} \quad \rightarrow \quad T^{ij} \vec{g}_i \times \vec{g}_j = \vec{0}, \quad (2.87)$$

wobei Gl. (2.87)₁ für jedes beliebige Teilvolumen des materiellen Körpers gilt. Die lokale Formulierung der Drehimpulsbilanz in räumlicher Darstellung mündet damit in der Symmetrie

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (2.88)$$

des Cauchyschen Spannungstensors⁶² \mathbf{T} . Aus der Substitution des Cauchyschen Spannungstensors mit dem ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor \mathbf{T}_R gemäß Gl. (2.52) folgt die Beziehung

$$\mathbf{T}_R \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \mathbf{T}_R^T \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{T}_R = \mathbf{F} \mathbf{T}_R^T \mathbf{F}^{-T}, \quad (2.89)$$

⁶⁰Der kontravariante Cauchy Spannungstensor besitzt die Komponentendarstellung $T^{ij} \vec{g}_i \otimes \vec{g}_j$, mit den Komponenten T^{ij} und den kovarianten Basisvektoren \vec{g}_i und \vec{g}_j . Die zugehörige Dualbasis ist durch \vec{g}^i gegeben.

⁶¹Hierbei muss zunächst zur Anwendung des Gaußschen Integralsatzes eine lineare Abbildung zur Definition des Kreuzprodukts zwischen einem Vektor und einem Tensor zweiter Stufe eingeführt werden. Die weitere Vorgehensweise erfolgt analog zur Impulsbilanz in Abschnitt 2.3.2, sodass die Kombination aus Reynoldsschen Transporttheorem (2.65), die lokale Massenerhaltung (2.69) und das Divergenztheorem (2.62)₂ auf das angegebene Resultat führen.

⁶²Die Komponentendarstellung des zweiten Ausdrucks in Gl. (2.87) ergibt unter Ausnutzung der Einsteinschen Summationskonvention

$$(T^{23} - T^{32}) \vec{g}^1 + (T^{31} - T^{13}) \vec{g}^2 + (T^{12} - T^{21}) \vec{g}^3 = \vec{0}.$$

Aus dem Koeffizientenvergleich resultiert schließlich die geforderte Symmetrieeigenschaft $T^{ij} = T^{ji}$.

d. h. der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor \mathbf{T}_R ist im Allgemeinen unsymmetrisch. Bei der Formulierung von Anfangs-Randwertproblemen, siehe Abschnitt 4, ist es daher nicht notwendig, die Drehimpulsbilanz als unabhängige Aussage einzubeziehen. Die Bilanzaussage wird lediglich implizit durch Voraussetzung der Symmetrie von \mathbf{T} , \mathbf{S} und $\tilde{\mathbf{T}}$ bzw. unter Beachtung von Gl. (2.89) für \mathbf{T}_R erfüllt.

2.3.4 Energiebilanz – Erster Hauptsatz der Thermodynamik

Bevor schwerpunktmäßig im folgenden Abschnitt eine weitere unabhängige Bilanzaussage, der sogenannte erste Hauptsatz der Thermodynamik, diskutiert wird, sollen als Einstieg in diese Thematik zunächst Aussagen zu einer Spezialisierung der allgemeinen Energiebilanz für mechanische Systeme getroffen werden. Die rein mechanische Energiebilanz⁶³ ist eine Folgerung aus der Massen-, Impuls- und Drehimpulsbilanz und stellt aus diesem Grund keine eigenständige Bilanzaussage dar. Die skalare Multiplikation der lokalen Impulsbilanz (2.79) mit \vec{v} ,

$$\rho \vec{v} \cdot \vec{v} = \left(\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \vec{k} \right) \cdot \vec{v}, \quad (2.90)$$

und die Anwendung der Produktregel auf

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}^T \vec{v}) = \operatorname{div} \mathbf{T} \cdot \vec{v} + \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \vec{v} \quad (2.91)$$

führen unter Beachtung der inversen Vorgehensweise⁶⁴ im Vergleich zu Abschnitt 2.3.2 zu der globalen Formulierung der mechanischen Energiebilanz (räumliche Darstellung)

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} dv + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} dv = \int_{\partial \chi_t[\mathcal{B}]} (\mathbf{T} \vec{n}) \cdot \vec{v} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \rho \vec{k} \cdot \vec{v} dv. \quad (2.92)$$

Im Folgenden werden die einzelnen Summandenterme genauer analysiert und die extensiven Energie- bzw. Leistungsgrößen sowohl in der räumlichen als auch in der materiellen

⁶³Die Begriffsbildung zur Bilanzierung von Energieströmen ist in der einschlägigen Fachliteratur nicht einheitlich. So verwenden beispielsweise Bertram und Glüge [2013] anstatt Energiebilanz die Begrifflichkeit Leistungsbilanz. In der vorliegenden Arbeit wird der Terminus Energiebilanz bevorzugt.

⁶⁴Die lokale räumliche Formulierung (2.90) wird unter Voraussetzung hinreichender Stetigkeitsanforderungen durch Integration über das Volumen des materiellen Körpers in eine globale Beziehung überführt. Die anschließende Anwendung des Gaußschen Integralsatzes (2.62)₂ und die Kombination des Reynoldsschen Transporttheorems (2.65) mit der lokalen Massenbilanz (2.69) führen auf das Zwischenergebnis

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} dv + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \vec{v} dv = \int_{\partial \chi_t[\mathcal{B}]} (\mathbf{T}^T \vec{v}) \cdot \vec{n} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \rho \vec{k} \cdot \vec{v} dv.$$

Darüber hinaus werden die Symmetrieeigenschaft von \mathbf{T} und die additive Zerlegung des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten aus Gl. (2.44) verwendet. Unter Berücksichtigung der Eigenschaft $\mathbf{T} \cdot \mathbf{W} = 0$, d. h. das Skalarprodukt zwischen einem symmetrischen und einem schiefsymmetrischen Tensor verschwindet, resultiert der angegebene Ausdruck (2.92). Folglich liefert nur \mathbf{D} einen Beitrag zum inneren Produkt.

Darstellung angegeben. Der erste Term auf der linken Seite von Gl. (2.92) repräsentiert die materielle Zeitableitung der sogenannten kinetischen Energie

$$\dot{K}(\mathcal{B}, t) = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \frac{1}{2} \varrho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t) \cdot \vec{v}(\vec{x}, t) dv = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \frac{1}{2} \varrho_{\mathcal{R}}(\vec{X}) \vec{v}(\vec{X}, t) \cdot \vec{v}(\vec{X}, t) dV. \quad (2.93)$$

Die Summe aus der zeitlichen Änderung \dot{K} der kinetischen Energie und der Spannungsleistung⁶⁵

$$\dot{L}_i(\mathcal{B}, t) = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \mathbf{T}(\vec{x}, t) \cdot \mathbf{D}(\vec{x}, t) dv = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \tilde{\mathbf{T}}(\vec{X}, t) \cdot \dot{\mathbf{E}}(\vec{X}, t) dV \quad (2.94)$$

entspricht der dem materiellen Körper \mathcal{B} zugeordneten Änderungsrate der totalen Energie⁶⁶ $E_{\text{tot}}(\mathcal{B}, t)$, d. h. $\dot{E}_{\text{tot}}(\mathcal{B}, t) = \dot{K}(\mathcal{B}, t) + \dot{L}_i(\mathcal{B}, t)$. Die mechanische Energiebilanz kann demnach als ein Gleichgewicht zwischen der materiellen Zeitableitung der totalen Energie und der Leistung der äußeren Kräfte

$$\dot{L}_a(\mathcal{B}, t) = \int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} (\mathbf{T} \vec{n}) \cdot \vec{v} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho \vec{k} \cdot \vec{v} dv = \int_{\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\mathbf{T}_{\mathcal{R}} \vec{n}_{\mathcal{R}}) \cdot \vec{v} dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathcal{R}} \vec{k} \cdot \vec{v} dV, \quad (2.95)$$

bestehend aus der Leistung der Oberflächenkräfte sowie der Leistung der Volumenkräfte, interpretiert werden. Zusammenfassend folgt die Gestalt

$$\dot{E}_{\text{tot}}(\mathcal{B}, t) = \dot{L}_a(\mathcal{B}, t) \iff \dot{K}(\mathcal{B}, t) + \dot{L}_i(\mathcal{B}, t) = \dot{L}_a(\mathcal{B}, t). \quad (2.96)$$

Die mechanische auf die Referenzkonfiguration bezogene Spannungsleistung (2.94) geht aus einer Rückwärtstransformation der räumlichen tensoriellen Größen \mathbf{T} und \mathbf{D} sowie aus einer Überführung des Volumenintegrals mit Hilfe von Gl. (2.25) hervor. Mit dem Bezug der beiden Ausdrücke aus Gl. (2.94) auf ein gemeinsames Volumenintegral und der Beziehung (2.70) kann die Äquivalenz der Integranden in der Form

$$p_i = \frac{1}{\varrho_{\mathcal{R}}} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{\varrho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} = \frac{1}{\varrho_{\mathcal{R}}} \mathbf{S} \cdot \mathbf{D} \quad (2.97)$$

nachgewiesen werden. Dabei kennzeichnet p_i eine rein mechanische, spezifische Spannungsleistung pro Masseneinheit. Neben dieser sachlichen Analyse enthält die Identität der Beziehungen, dass jedem auf einer bestimmten Konfiguration operierenden Spannungstensor ein energetisch konjugierter Verzerrungstensor in derselben Konfiguration zugeordnet werden kann. Für die Zweipunkt-Tensoren $\mathbf{T}_{\mathcal{R}}$ und $\dot{\mathbf{F}}$, die eine Abbildung von der Referenz- auf die Momentankonfiguration darstellen, gilt analog $p_i = 1/\varrho_{\mathcal{R}} \mathbf{T}_{\mathcal{R}} \cdot \dot{\mathbf{F}}$. Die natürliche Verbindung zwischen dynamischen und kinematischen Größen wird in den Arbeiten von Hill [1968], Hill [1970] und Haupt und Tsakmakis [1989] sowie Haupt und

⁶⁵Die Spannungsleistung wird auch als Leistung der inneren Kräfte bezeichnet.

⁶⁶Eine thermodynamisch verallgemeinerte Definition von $E_{\text{tot}}(\mathcal{B}, t)$ wird in den nachfolgenden Ausführungen in Gl. (2.100) nachgereicht.

Tsakmakis [1996] beschrieben und ist mit den Begriffen von konjugierten und dualen Variablen verbunden, siehe hierzu auch Abschnitt 2.5.2.

Wie eingangs angedeutet, entspricht die mechanische Energiebilanz keiner unabhängigen Bilanzangabe und ist daher für die Definition eines Anfangs-Randwertproblems, siehe Abschnitt 4, nur von untergeordnetem Interesse. Die Erfahrung zeigt jedoch, dass nicht die gesamte Spannungsleistung in Form einer inneren Energie im materiellen Körper gespeichert wird. Bei realen Prozessen ist eine thermodynamische Erweiterung der Energiebilanz auf den sogenannten ersten Hauptsatz der Thermodynamik erforderlich, da alle Bewegungen von Kontinua auch mit thermischen Erscheinungen, wie z. B. die Abgabe von Wärme an die Umgebung oder im Inneren des Körpers ablaufenden Dissipationsprozessen (innere Reibungsprozesse), einhergehen. Die Ausdehnung der Kontinuumsbetrachtungen auf eine Kopplung von mechanischen und thermischen Feldgrößen⁶⁷ ermöglicht es, Aussagen über den Energieaustausch eines materiellen Körpers mit seiner Umgebung zu treffen. Als vorbereitende Schritte werden zunächst die Begriffe der inneren Energie $E(\mathcal{B}, t)$ und die zeitliche Änderung der Wärme $Q(\mathcal{B}, t)$ eingeführt. Die zuletzt genannte Größe wird im Folgenden auch als Wärmefluss bezeichnet. Die extensive Größe der inneren Energie für einen materiellen Körper \mathcal{B} ist definiert als das Volumenintegral⁶⁸

$$E(\mathcal{B}, t) = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho(\vec{x}, t) e(\vec{x}, t) dv = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R(\vec{X}) e(\vec{X}, t) dV, \quad (2.98)$$

wobei e die spezifische innere Energie pro Masseneinheit kennzeichnet. Der von außen eingebrachte Wärmefluss

$$Q(\mathcal{B}, t) = - \int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} \vec{q} \cdot \vec{n} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} r_\Theta \varrho dv = - \int_{\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{q}_R \cdot \vec{n}_R dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} r_\Theta \varrho_R dV \quad (2.99)$$

setzt sich in analoger Weise zur Leistung der äußeren Kräfte, vgl. Gl. (2.95), aus einer oberflächenverteilten Wärmeflussdichte $\vec{q} = -\vec{q} \cdot \vec{n}$ (siehe Gl. (2.54)) bzw. $q_R = -\vec{q}_R \cdot \vec{n}_R$ (siehe Gl. (2.56)) und einer volumenverteilten skalaren Wärmequelle r_Θ zusammen. Das Minuszeichen in Gl. (2.99) resultiert aus der Konvention, dass der auf die Fläche bezogene Wärmefluss q bzw. q_R negativ ist, wenn der Körper Wärme abstrahlt. Die erweiterte Energiebilanz (der erste Hauptsatz der Thermodynamik) liefert die Aussage, dass sich die zeitliche Änderung der Gesamtenergie (totale Energie)

$$E_{\text{tot}} = K + E, \quad (2.100)$$

bestehend aus innerer Energie E und kinetischer Energie K , im Gleichgewicht mit der Leistung der äußeren Kräfte L_a (mechanischer Anteil) und des Wärmeflusses Q (nichtmechanischer Anteil) befindet:

$$\dot{E}_{\text{tot}}(\mathcal{B}, t) = L_a(\mathcal{B}, t) + Q(\mathcal{B}, t) \iff \dot{K}(\mathcal{B}, t) + \dot{E}(\mathcal{B}, t) = L_a(\mathcal{B}, t) + Q(\mathcal{B}, t) \quad (2.101)$$

⁶⁷Die Kopplung anderer physikalischer Felder ist in dieser Arbeit nicht von Interesse.

⁶⁸Die innere Energie setzt sich z. B. aus den Anteilen der Formänderungsenergie, der potentiellen Energie, der thermischen Energie sowie der chemischen Energie zusammen.

Unter Verwendung der Gleichungen (2.93), (2.95), (2.98) und (2.99) ergibt sich die globale Formulierung des ersten Hauptsatzes in räumlicher Darstellung zu

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \left(\frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{v} + e \right) \varrho \, dv = \int_{\partial \chi_t[\mathcal{B}]} (\mathbf{T}^T \vec{v} - \vec{q}) \cdot \vec{n} \, da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} (\vec{k} \cdot \vec{v} + r_\Theta) \varrho \, dv. \quad (2.102)$$

Der zugehörige lokale Ausdruck, als partielle Differentialgleichung, führt unter Berücksichtigung des Gaußschen Integralsatzes, der Impuls- und Drehimpulsbilanz sowie von Gl. (2.91)⁶⁹ auf

$$\dot{e} = \frac{1}{\varrho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \frac{1}{\varrho} \operatorname{div} \vec{q} + r_\Theta. \quad (2.103)$$

Die lokale Energiebilanz, formuliert mit auf die Referenzkonfiguration bezogenen Größen, lautet:

$$\dot{e} = \frac{1}{\varrho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{\varrho_R} \operatorname{Div} \vec{q}_R + r_\Theta \quad (2.104)$$

2.3.5 Entropiebilanz – Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik gibt Auskunft darüber, dass die totale Energie (Gesamtenergie), siehe Gl. (2.100), eines abgeschlossenen Systems⁷⁰ konserviert wird und innerhalb des Systems nur Transformationen von einer Energieform in eine andere ablaufen. Das fundamentale Axiom enthält allerdings keine Informationen über die Richtung und Art des Energietransports. Die Erfahrung zeigt jedoch, dass reale Prozesse richtungsabhängig sind und nicht ohne weiteres umgekehrt werden können, also irreversibel ablaufen. Exemplarisch sei als wahrscheinlich bekanntestes Beispiel der Widerspruch in dem nicht von selbst ablaufenden Wärmeübergang, bei dem Wärme von einer Region mit niedriger Temperatur auf eine Region mit höherer Temperatur übergeht, angeführt. Diese autonom ablaufende Wärmeübertragung ist gemäß des ersten Hauptsatzes möglich, konnte jedoch bislang nicht festgestellt werden. Die fehlenden Angaben über Art und Richtung des Energietransfers wird durch den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik auf Basis des Entropie- und Temperaturkonzepts bereitgestellt. Hierbei entspricht die Entropie einer extensiven und die Temperatur einer intensiven Zustandsvariablen. Nach Altenbach [2015] kann die Entropie als Maß für den Energieanteil angesehen werden, welcher eine irreversible Umwandlung in nicht mehr in mechanische Arbeit umsetzbare Energie erfährt. Aus einer mikromechanischen Betrachtungsweise heraus wird ausgehend von einem geordneten Anfangszustand ein Entropiezuwachs als die zunehmende mikroskopische Unordnung im Kontinuum interpretiert. Im Rahmen der Kontinuumsthermodynamik haben sich zahlreiche Darstellungen für den zweiten Hauptsatz etabliert.⁷¹ In der vorliegenden Arbeit wird jedoch nur die Dissipationsungleichung nach Clausius-Duhem, welche sich nach den bisherigen Erfahrungen bewährt hat, in einer

⁶⁹Eine detailliertere Herleitung ist u. a. in [Holzapfel, 2000; Haupt, 2002] zu finden.

⁷⁰Nach Altenbach [2015] ist in einem abgeschlossenen System (isolierten System) kein Austausch von Energie und Materie möglich.

⁷¹Im Gegensatz zur Impulsbilanz stellt der zweite Hauptsatz kein allgemeingültiges Axiom dar, da zahlreiche Unsicherheiten bei der Charakterisierung von Nichtgleichgewichtszuständen existieren. Für weitere Erläuterungen sei auf [Hutter und Jöhnk, 2004] referiert.

räumlichen Darstellung eingehender betrachtet. Entsprechend den Begriffsdefinitionen im Rahmen der Kontinuumsmechanik wird die extensive, physikalische Zustandsgröße der Entropie eines materiellen Körpers \mathcal{B} ganz formal als Volumenintegral

$$\mathcal{S}(\mathcal{B}, t) = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} s(\vec{x}, t) \varrho(\vec{x}, t) dv \quad (2.105)$$

über eine innere Entropiedichte pro Masseneinheit s , der sogenannten spezifischen inneren Entropie, und der Massendichte ϱ eingeführt. Analog zu Abschnitt 2.3 werden ein Fluss- und Zuführungsterm definiert, die zusammen einen Entropiestrom

$$\mathcal{H}(\mathcal{B}, t) = - \int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} \vec{\Sigma}(\vec{x}, t) \cdot \vec{n}(\vec{x}, t) da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \sigma(\vec{x}, t) \varrho(\vec{x}, t) dv \quad (2.106)$$

infolge des Wärmetransports Q repräsentieren. Die Spezifikation der oberflächen- und volumenverteilten Entropiedichten als

$$\vec{\Sigma} = \frac{1}{\Theta} \vec{q} \quad \text{bzw.} \quad \sigma = \frac{1}{\Theta} r_\Theta \quad (2.107)$$

entspricht lediglich einer Approximation, welche in Anlehnung an die Gleichgewichtsthermodynamik von homogenen Systemen, siehe [Haupt, 2002], getroffen wird. Im Rahmen dieser Theorie wird der Entropietransfer H als Quotient aus zugeführter Wärme Q und absoluter Temperatur Θ definiert, sodass die Ausdrücke in Gl. (2.107) folgen. Diese Annahme, welche streng genommen nur für Prozesse in der Nähe ihres Gleichgewichts eine gute Approximation darstellt, findet auch für dynamisch ablaufende Prozesse außerhalb ihres Gleichgewichtszustands Anwendung. Die absolute Temperatur oder die auch als thermodynamische Temperatur bezeichnete intensive, also von der Stoffmenge unabhängige, Feldgröße

$$\Theta: \begin{cases} \mathcal{B} \times \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{R}^+ \\ (\mathcal{P}, t) & \mapsto \Theta(\mathcal{P}, t) = \Theta(\vec{x}, t) = \Theta(\vec{X}, t) \end{cases} \quad (2.108)$$

charakterisiert den thermodynamischen Zustand eines materiellen Punktes \mathcal{P} . Zur Vervollständigung der Entropiebilanz wird rein formal der durch irreversible Prozesse erzeugte Entropieproduktionsterm

$$\mathcal{I}(\mathcal{B}, t) = \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \gamma(\vec{x}, t) \varrho(\vec{x}, t) dv, \quad (2.109)$$

mit der spezifischen Dichteverteilung γ , definiert. Dementsprechend hat die resultierende Bilanzaussage in Anlehnung an Gl. (2.61) die Gestalt

$$\dot{\mathcal{S}}(\mathcal{B}, t) = \mathcal{H}(\mathcal{B}, t) + \mathcal{I}(\mathcal{B}, t) \quad (2.110)$$

oder ausgedrückt durch die Gleichungen (2.105) bis (2.107) und (2.109)

$$\frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} s \varrho dv = - \int_{\partial\chi_t[\mathcal{B}]} \frac{1}{\Theta} \vec{q} \cdot \vec{n} da + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \frac{1}{\Theta} r_\Theta \varrho dv + \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \gamma \varrho dv. \quad (2.111)$$

Entgegen den bisher vorgestellten Bilanzgleichungen dient die Entropiebilanz lediglich zur Definition der rein formal eingeführten Entropieproduktion $\Gamma = \dot{S} - H$, dessen physikalische Bedeutung sich im zweiten Hauptsatz der Thermodynamik als Prinzip der Irreversibilität ausdrückt. Die vorerst in Form eines allgemeingültigen Naturgesetzes postulierte Ungleichung

$$\Gamma(\mathcal{B}, t) = \dot{S}(\mathcal{B}, t) - H(\mathcal{B}, t) \geq 0 \quad (2.112)$$

sagt aus, dass für einen realen, irreversibel ablaufenden Prozess die Entropieproduktion stets positiv ist. Es ist ausgeschlossen, dass Entropie durch beliebig geartete Senken im materiellen Körper annihilert wird. Im Fall eines idealisierten, reversibel ablaufenden Prozesses gilt das Gleichheitszeichen. An dieser Stelle muss hervorgehoben werden, dass die Entropieungleichung keinen Beitrag zur Bestimmung der physikalischen Feldgrößen leistet. Sie ist vielmehr als eine Nebenbedingung zu verstehen, die durch die Lösungen der anderen Bilanzgleichungen erfüllt sein sollte. Unter Berücksichtigung der oben getroffenen Annahme (2.107) für die Entropiezuführung H und der Ausdrücke (2.105), (2.106) und (2.109) resultiert die globale Formulierung

$$\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \gamma \varrho \, dv = \frac{d}{dt} \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} s \varrho \, dv + \int_{\partial \chi_t[\mathcal{B}]} \frac{1}{\Theta} \vec{q} \cdot \vec{n} \, da - \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \frac{1}{\Theta} r_\Theta \varrho \, dv \geq 0. \quad (2.113)$$

Die zugehörige lokale Form in räumlicher Darstellung unter Beachtung hinreichender Stetigkeitsanforderungen sowie der Einhaltung der bisher angewendeten Standardvorgehensweise führt auf die Beziehung

$$\Theta \gamma = \Theta \dot{s} + \frac{1}{\varrho} (\operatorname{div} \vec{q} - \varrho r_\Theta) - \frac{1}{\varrho \Theta} \operatorname{grad} \Theta \cdot \vec{q} \geq 0, \quad (2.114)$$

wobei zusätzlich die Identität

$$\operatorname{div} \left(\frac{\vec{q}}{\Theta} \right) = \frac{1}{\Theta} \operatorname{div} \vec{q} - \frac{1}{\Theta^2} \operatorname{grad} \Theta \cdot \vec{q} \quad (2.115)$$

ausgenutzt wird. Durch Substitution der lokalen Wärmezufuhr in Gl. (2.114) mit Hilfe der lokalen Energiebilanz (2.103) ergibt sich die Ungleichung

$$\Theta \gamma = -\dot{e} + \Theta \dot{s} + \frac{1}{\varrho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \frac{1}{\varrho \Theta} \operatorname{grad} \Theta \cdot \vec{q} \geq 0. \quad (2.116)$$

In materieller Darstellung nimmt die Ungleichung unter Beachtung der Transformationsvorschrift $\operatorname{grad} \Theta = \mathbf{F}^{-T} \operatorname{Grad} \Theta$ die Gestalt

$$\Theta \gamma = -\dot{e} + \Theta \dot{s} + \frac{1}{\varrho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{\varrho_R \Theta} \operatorname{Grad} \Theta \cdot \vec{q}_R \geq 0 \quad (2.117)$$

an. Das Produkt $\delta = \Theta \gamma$ trägt die Bezeichnung innere Dissipation. Bei der Formulierung thermodynamisch konsistenter Materialmodelle⁷² ist es häufig zweckmäßig die sogenannte

⁷²Hiermit sind konstitutive Beziehungen gemeint, die den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik erfüllen.

Helmholtz-Energie (freie Energie)⁷³

$$\hat{\psi} = e - \Theta s \quad (2.118)$$

in die vorliegende Definition des zweiten Hauptsatzes einzubeziehen. Für die lokale räumliche Darstellung der Ungleichung folgt dann

$$\delta = -\dot{\hat{\psi}} - s\dot{\Theta} + \frac{1}{\varrho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \frac{1}{\varrho\Theta} \text{grad } \Theta \cdot \vec{q} \geq 0, \quad (2.119)$$

wobei die lokale materielle Formulierung der Dissipationsungleichung die Gestalt

$$\delta = -\dot{\hat{\psi}} - s\dot{\Theta} + \frac{1}{\varrho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{\varrho_R\Theta} \text{Grad } \Theta \cdot \vec{q}_R \geq 0 \quad (2.120)$$

annimmt.

2.4 Geometrische Linearisierung

Die bisher dargestellten kinematischen und kinetischen Größen sowie die verknüpfenden Bilanzgleichungen sind für beliebige Bewegungen und Formänderungen gültig. Da in vielen technischen Anwendungsbereichen die Deformationen a priori als sehr klein angesehen werden können, lassen sich durch eine geometrische Linearisierung der finiten Verformungsmaße erhebliche Vereinfachungen angeben. Diese damit einhergehenden Näherungen liefern jedoch für viele Ingenieursanwendungen hinreichend genaue Aussagen. Die Theorie kleiner Deformationen basiert auf der Darstellung der Bewegung eines materiellen Körpers durch den Verschiebungsvektor, siehe Gl. (2.5), mit dessen Hilfe die Deformation in Bezug auf die Referenzkonfiguration ausgedrückt werden kann. Nach Haupt [2002] können Bewegungen bzw. Deformationen als klein bewertet werden, wenn der Verschiebungsvektor \vec{u} und dessen Gradient⁷⁴ \mathbf{H} folgende Kriterien erfüllen:

$$|\vec{u}(\vec{X}, t)| \ll L_0, \quad (2.121)$$

$$\|\mathbf{H}\|_F = \|\mathbf{F} - \mathbf{1}\|_F \ll 1 \quad (2.122)$$

Hierbei entspricht L_0 einer charakteristischen Länge des betrachteten materiellen Körpers und $\|\mathbf{H}\|_F$ kennzeichnet die Frobenius-Norm⁷⁵ des Verschiebungsgradienten. Zur

⁷³Mit der Formulierung eines thermodynamischen Potentials, was in vielen Fällen die Helmholtz-Energie ist, werden Konstitutivmodelle, siehe Abschnitt 2.5.3, zur Beschreibung thermomechanischer Prozesse hergeleitet.

⁷⁴Der Verschiebungsgradient \mathbf{H} aus Gl. (2.27) kann nur als klein bewertet werden, wenn Verzerrungen und Rotationen infinitesimal ausfallen. Demnach besitzt die sogenannte infinitesimale Verzerrungstheorie bzw. die auf einer geometrischen Linearisierung aufbauende Theorie auch für beliebig große Starrkörpertranslationen weiterhin Gültigkeit. Zum Ausschluss dieses allgemeineren Falls wird die Annahme (2.121) getroffen, sodass in dieser Arbeit lediglich die Theorie kleiner Deformationen (kleiner Verschiebungen) Beachtung findet. Da auch in der Literatur keine einheitliche Namensgebung oder Kennzeichnung existiert, wird im Folgenden auf eine exakte Differenzierung bzw. Klassifizierung der Theorien verzichtet.

⁷⁵Die Frobenius-Norm eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{H} ist definiert als $\|\mathbf{H}\|_F = \sqrt{\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}}$.

Beurteilung der Größenordnung von Tensoren wird im Folgenden die Landau-Symbolik⁷⁶ verwendet. Es ist nun möglich im Rahmen einer geometrischen Linearisierung, bei welcher alle Terme höherer Ordnung $\mathcal{O}(\|\mathbf{H}\|_F^n)$, $n \geq 2$, vernachlässigt werden, die kinematischen Größen aus den Abschnitten 2.1.3 und 2.1.4 zu vereinfachen. Die Tabelle 2.2 fasst die

Tabelle 2.2: Geometrisch linearisierte Deformations-, Rotations- und Verzerrungstensoren

Verschiebungs- und Deformationsgradient	
$\mathbf{H} = \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F) = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \frac{1}{2}(\mathbf{H} - \mathbf{H}^T) = \mathbf{E}_L + \mathbf{R}_L$	(2.124)
$\mathbf{F} = \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F) = \mathbf{1} + \mathbf{H} = \mathbf{1} + \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \frac{1}{2}(\mathbf{H} - \mathbf{H}^T) = \mathbf{1} + \mathbf{E}_L + \mathbf{R}_L$	(2.125)
$\mathbf{F}^{-1} = (\mathbf{1} + \mathbf{H})^{-1} = \mathbf{1} - \mathbf{H} + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{1} - \mathbf{H}$	(2.126)
$\det \mathbf{F} = \det(\mathbf{1} + \mathbf{H}) = 1 + \text{tr} \mathbf{H} + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx 1 + \text{tr} \mathbf{H} = 1 + \text{tr} \mathbf{E}_L$	(2.127)
Deformationstensoren	
$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{1} + \mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T \mathbf{H} = \mathbf{1} + \mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{1} + 2\mathbf{E}_L$	(2.128)
$\mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T = \mathbf{1} + \mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H} \mathbf{H}^T = \mathbf{1} + \mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{1} + 2\mathbf{E}_L$	(2.129)
Strecktensoren	
$\mathbf{U} = \sqrt{\mathbf{C}} = \mathbf{1} + \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{1} + \mathbf{E}_L$	(2.130)
$\mathbf{V} = \sqrt{\mathbf{B}} = \mathbf{1} + \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{1} + \mathbf{E}_L$	(2.131)
Rotationstensor	
$\mathbf{R} = \mathbf{F} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{1} + \frac{1}{2}(\mathbf{H} - \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{1} + \mathbf{R}_L$	(2.132)
Verzerrungstensoren	
$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{E}_L$	(2.133)
$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \mathbf{E}_L$	(2.134)

Vereinfachungen zusammen. Das Resultat ist eine kinematische Vereinheitlichung, bei der alle Deformations-, Streck- und Verzerrungstensoren in Abhängigkeit des symmetrischen

⁷⁶In Anlehnung an Altenbach [2015] wird das Landau-Symbol $\mathcal{O}(\|\mathbf{H}\|_F^n)$ für eine beliebige tensorwertige Funktion $\mathbf{G}(\mathbf{H})$ basierend auf der Ungleichung

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{H})\|_F < C \|\mathbf{H}\|_F^n \quad \text{für} \quad \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{0} \quad (2.123)$$

definiert, wobei mindestens eine positive, reellwertige Konstante $C \in \mathbb{R}^+$ existiert. Damit entspricht die Landau-Symbolik einer kompakten Notation zum Ausdrücken der Größenordnung von \mathbf{G} , sodass die Funktion $\mathbf{G}(\mathbf{H})$ durch $\mathbf{G}(\mathbf{H}) = \mathcal{O}(\|\mathbf{H}\|_F^n)$ substituiert werden kann.

Anteils des Verschiebungsgradienten, den linearisierten Verzerrungstensor

$$\mathbf{E}_L = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T), \quad (2.135)$$

dargestellt werden können. Die geometrisch lineare Theorie macht demnach eine Unterscheidung von auf der Referenz- bzw. auf der Momentankonfiguration operierenden Größen überflüssig. Darüber hinaus wird im Fall infinitesimaler Verzerrungen ersichtlich, dass die polare Zerlegung des Deformationsgradienten \mathbf{F} , siehe Gl. (2.28), in eine additive Zerlegung des Verschiebungsgradienten \mathbf{H} , siehe Gl. (2.124), aus dem symmetrischen linearisierten Verzerrungstensor $\mathbf{E}_L = 1/2(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T)$ und dem antisymmetrischen linearisierten Rotationstensor $\mathbf{R}_L = 1/2(\mathbf{H} - \mathbf{H}^T)$ zerfällt.⁷⁷ Nach Haupt [2002] impliziert die Definition (2.121), dass Referenz- und Momentankonfiguration sehr nahe beieinander liegen, woraus die folgenden Approximationen

$$\vec{X} \approx \vec{x} \iff \vec{u}(\vec{X}, t) = \vec{u}(\vec{x}, t) \iff \mathbf{H} = \text{Grad } \vec{u}(\vec{X}, t) \approx \text{grad } \vec{u}(\vec{x}, t) \quad (2.136)$$

hervorgehen. Im Rahmen einer geometrisch linearen Theorie ist also eine Unterscheidung der Feldgrößen hinsichtlich einer Lagrangeschen bzw. einer Eulerschen Betrachtungsweise nicht mehr erforderlich.⁷⁸

Die asymptotischen Näherungen für die in Abschnitt 2.1.5 vorgestellten Deformationsgeschwindigkeiten erfordern neben Gl. (2.122) die Annahme $\|\dot{\mathbf{H}}\|_F \ll 1$, sodass im Rahmen der Linearisierung die Gültigkeit der Approximation $\dot{\mathbf{H}}\mathbf{H} = \mathcal{O}(\|\mathbf{H}\|_F^2)$ vorausgesetzt werden kann. Tabelle 2.3 fasst die Beziehungen für die ratenabhängigen Deformationsgrößen, welche mit Hilfe der materiellen Zeitableitungen von \mathbf{E}_L und \mathbf{R}_L gebildet werden, zusammen.

In Analogie zu den Verzerrungstensoren folgt aus der Zusammenlegung von Referenz- und Momentankonfiguration die Äquivalenz sämtlicher dynamischer Größen. Es gilt:

$$\vec{t} = \vec{t}_R \iff \mathbf{T} = \mathbf{S} = \mathbf{T}_R = \tilde{\mathbf{T}}, \quad (2.142)$$

$$q = q_R \iff \vec{q} = \vec{q}_R \quad (2.143)$$

Zum Abschluss dieses Abschnitts stellt Tabelle 2.4 alle Bilanzgleichungen, ausgedrückt mit den im Rahmen einer geometrisch linearen Theorie approximierten Größen, dar. Aufgrund der Gleichwertigkeit der dynamischen Größen werden zur Formulierung der Bilanzgleichungen nur Variablen herangezogen, welche bereits im Zusammenhang mit einer räumlichen Darstellung verwendet wurden. In den Gleichungen (2.144) bis (2.148)

⁷⁷Nach [Haupt, 2002] gilt: $\mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R} = \mathbf{1} + \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \frac{1}{2}(\mathbf{H} - \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\|\mathbf{H}\|_F^2)$

⁷⁸Durch den Wegfall der Differenzierung zwischen Momentan- und Referenzkonfiguration werden im Rahmen der Theorie kleiner Deformationen nur noch die räumlichen Feldbetrachtungen und räumlichen Differentialoperatoren $\text{grad}(\cdot)$ bzw. $\text{div}(\cdot)$ verwendet. Die einzige Ausnahme hierbei bildet die Massendichte $\varrho(\vec{x})$, siehe Gl. (2.149), für welche infolge der geometrischen Linearisierung auch eine Approximation $\bar{\varrho}(\vec{x}, t) = \varrho(\vec{x})(1 - \text{tr } \mathbf{E}_L) = \varrho(\vec{x})(1 - \text{div } \vec{u}(\vec{x}, t))$ in der deformierten Konfiguration existiert. Die Spur von \mathbf{E}_L definiert im Bereich kleiner Deformationen die Volumendehnung

$$\varepsilon_{Lv} := \text{tr } \mathbf{E}_L = \text{div } \vec{u}. \quad (2.137)$$

Tabelle 2.3: Geometrisch linearisierte Verzerrungsgeschwindigkeiten

Geschwindigkeitsgradienten	
$\dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{H}} = \dot{\mathbf{E}}_L + \dot{\mathbf{R}}_L$	(2.138)
$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{H}}(\mathbf{1} - \mathbf{H} + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2)) = \dot{\mathbf{H}} + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \dot{\mathbf{H}} = \dot{\mathbf{E}}_L + \dot{\mathbf{R}}_L$	(2.139)
Verzerrungsgeschwindigkeits- und Drehgeschwindigkeitstensor	
$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) = \dot{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L} = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{H}} + \dot{\mathbf{H}}^T) + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \dot{\mathbf{E}}_L$	(2.140)
$\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{H}} - \dot{\mathbf{H}}^T) + \mathcal{O}(\ \mathbf{H}\ _F^2) \approx \dot{\mathbf{R}}_L$	(2.141)

kennzeichnen Ω und A die deformationsunabhängigen Volumen- und Oberflächenintegrationsgebiete des materiellen Körpers. Zudem werden alle materiellen in partielle Zeitableitungen überführt.

2.5 Materialtheorie

Das Hauptaugenmerk der Kontinuumsmechanik als phänomenologisch geprägte Feldtheorie liegt in der Bestimmung des makroskopischen Zustands eines Kontinuums, welcher durch einen Satz von Zustandsvariablen, z. B. in Form der Dichte, der Bewegung,⁷⁹ und der Temperatur, eindeutig beschrieben wird, siehe [Altenbach, 2015]. Die fünf vorgestellten Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie aus Abschnitt 2.3 beschreiben allgemeingültige Prinzipien und bilden die Basis für eine materialunabhängige Beschreibung der makroskopischen Eigenschaften eines Kontinuums. Bei genauerer Betrachtung ist jedoch festzustellen, dass die resultierenden Anfangs-Randwertprobleme aufgrund einer Reihe weiterer Kopplungen von Zustandsgrößen in den Bilanzgleichungen unterbestimmt sind und nicht selbständig gelöst werden können.⁸⁰ Es fehlen konstitutive Beziehungen in Form von algebraischen Gleichungen, Differential- oder Integralgleichungen, die eine Verbindung zwischen kinematischen und kinetischen Größen bzw. den oben aufgeführten Zustandsvariablen und den verbleibenden unbe-

⁷⁹Alternativ kann auch das Verschiebungsfeld herangezogen werden.

⁸⁰Für ein allgemeines, dreidimensionales, thermomechanisches Anfangs-Randwertproblem stehen in einer materiellen Darstellung mit der Impuls- und Energiebilanz, siehe Gleichungen (2.78) und (2.104), vier skalare Bilanzaussagen zur Verfügung, die durch einen Satz von fünfzehn unbekannten Feldgrößenkomponenten, resultierend aus \vec{u} , Θ , $\vec{\mathbf{T}}$, \vec{q}_R , e und s , gekoppelt sind. In dieser Aufstellung haben bereits die Symmetrieeigenschaften von $\vec{\mathbf{T}}$ und die als bekannt vorausgesetzte Massendichte in der Referenzkonfiguration ϱ_R Berücksichtigung gefunden, sodass die Drehimpulsbilanz und die Massenerhaltung nicht weiter relevant sind. Die Clausius-Duhem-Ungleichung stellt eine zu erfüllende Nebenbedingung dar. Folglich sind für ein System, bestehend aus einem Material, elf konstitutive Beziehungen, z. B. für $\vec{\mathbf{T}}$, \vec{q}_R , e und s , zu formulieren. Der primäre Satz von Zustandsgrößen, welcher den verbleibenden vier Bilanzgleichungen zugeordnet werden kann, setzt sich dann aus \vec{u} und Θ , den sogenannte Primärvariablen, zusammen.

Tabelle 2.4: Bilanzgleichungen der Thermomechanik im Rahmen der Theorie kleiner Deformationen

Globale Formulierung der Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{x}, t) dV = 0 \quad (2.144)$$

$$\int_{\Omega} \varrho(\vec{x}) \frac{\partial \vec{v}(\vec{x}, t)}{\partial t} dV = \int_A \mathbf{T}(\vec{x}, t) \vec{n}(\vec{x}, t) dA + \int_{\Omega} \varrho(\vec{x}) \vec{k}(\vec{x}, t) dV \quad (2.145)$$

$$\int_{\Omega} (\vec{x} - \vec{c}) \times \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \varrho dV = \int_A (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{t} dA + \int_{\Omega} (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{k} \varrho dV \quad (2.146)$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{v} + e \right) \varrho dV = \int_A (\mathbf{T}^T \vec{v} - \vec{q}) \cdot \vec{n} dA + \int_{\Omega} (\vec{k} \cdot \vec{v} + r_{\Theta}) \varrho dV \quad (2.147)$$

$$\int_{\Omega} \gamma \varrho dV = \int_{\Omega} \frac{\partial s}{\partial t} \varrho dV + \int_A \frac{1}{\Theta} \vec{q} \cdot \vec{n} dA - \int_{\Omega} \frac{1}{\Theta} r_{\Theta} \varrho dV \geq 0 \quad (2.148)$$

Lokale Formulierung der Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{x}, t) = 0 \iff \varrho(\vec{x}, t) = \varrho(\vec{x}) \quad (2.149)$$

$$\varrho(\vec{x}) \dot{\vec{v}}(\vec{x}, t) = \operatorname{div} \mathbf{T}(\vec{x}, t) + \varrho(\vec{x}) \vec{k}(\vec{x}, t) \quad (2.150)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (2.151)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \frac{1}{\varrho} \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{E}}_L - \frac{1}{\varrho} \operatorname{div} \vec{q} + r_{\Theta} \quad (2.152)$$

$$\delta = -\frac{\partial e}{\partial t} + \Theta \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{1}{\varrho} \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{E}}_L - \frac{1}{\varrho \Theta} \operatorname{grad} \Theta \cdot \vec{q} \geq 0 \quad (2.153)$$

kannten Größen herstellen. Hierzu zählen z. B. Beziehungen, die Spannungen mit den Verzerrungen oder den Wärmestrom mit dem Temperaturfeld verknüpfen. Diese Funktionalbeziehungen, siehe [Haupt, 2002, S. 279–292], werden als Konstitutivgleichungen bzw. Materialgleichungen bezeichnet und sind das Resultat eines mathematischen Modells zur Beschreibung der geforderten Materialeigenschaften. Im Gegensatz zu den Bilanzformulierungen besitzen Konstitutivgleichungen keine allgemeingültige Aussagekraft, sondern sind auf gewisse Anwendungsbereiche und Prozesskombinationen beschränkt. Es ist nicht realisierbar ein allgemein gültiges Materialmodell zu entwickeln, welches für beliebige Eingangsprozesse eine adäquate Materialantwort liefert. Die Materialtheorie als ein Teilgebiet der Kontinuumsmechanik verwendet systematische Methoden⁸¹ zur Konstruktion von Materialmodellen, wobei deren eindeutige Trennung mitunter sehr schwierig sein kann. Alle Konzepte versuchen jedoch die Einhaltung grundlegender Prinzipien bei der systematischen Ableitung eines Modells zu gewährleisten. Die durch Monographien von Truesdell und Toupin [1960] und Truesdell und Noll [1965b] in die wissenschaftliche Diskussion eingeführten konstitutiven Prinzipien sollen die physikalische Widerspruchsfreiheit der Materialgleichungen sicherstellen. Sie werden in der folgenden Aufzählung, welche sich an den Darstellungen in [Holzapfel, 2000; Haupt, 2002; Helm, 2003; Hutter und Jöhnk, 2004; Altenbach, 2015] orientiert, kategorisiert.

Determinismus: Das Determinismusprinzip sagt aus, dass der aktuelle Zustand eines materiellen Körpers nur von der Prozessvorgeschichte, welche das Kontinuum durchlaufen hat, abhängt. Dies schließt auch die Beeinflussung des Materialverhaltens durch den aktuellen Beanspruchungszustand ein. Das sehr allgemein formulierte Axiom entspricht der Beschreibung des Materialverhaltens durch Funktionale⁸² in der Zeit, die für das Kontinuum ein Gedächtnis der gesamten Vorgeschichte bis zum aktuellen Zeitpunkt ausdrücken. Eine räumliche Eingrenzung der Wirkung wird nicht vorgenommen, sodass jeder materielle Punkt durch alle anderen materiellen Punkte beeinflusst werden kann.

Lokale Wirkung: Eine Eingrenzung des Determinismusprinzips wird durch das Axiom der lokalen Wirkung vorgenommen, wobei der Zustand eines materiellen Punktes nur durch seine Umgebung beeinflusst werden kann. Eine Beschränkung auf die differentielle Nachbarschaft eines materiellen Punktes führt auf eine Materialbeschreibung durch gradientenbasierte Größen, wie z. B. den Deformationsgradient, siehe Abschnitt 2.1.3. Derartige Modelle werden als Materialien ersten Grades

⁸¹Eine Einteilung dieser Vorgehensweisen nach Altenbach [2015] zur Ableitung konstitutiver Beziehungen kann beispielsweise in drei Klassen erfolgen. Induktive Methoden stützen sich bei der Entwicklung eines Materialmodells vorrangig auf experimentelle Auswertungen. Innerhalb einer deduktiven Herangehensweise wird die konstitutive Gleichungsstruktur auf theoretischem Weg durch die Erfüllung grundlegender Prinzipien in der Materialtheorie sowie die Sicherstellung von widerspruchsfreien Bilanzaussagen geformt. Ein anderes Konzept verwendet zur Entwicklung einer einfachen Grundstruktur rheologische Modelle. Die aus einer endlichen Anzahl von massenlosen Federn, Dämpfern und Reibungselementen aufgebauten Systeme werden so angeordnet, dass die rheologischen Netzwerke in der Lage sind, die im Experiment beobachteten Phänomene wiederzugeben. Exemplarisch sei hierzu auf Arbeiten von Lion [2000a], Haupt und Sedlan [2001] und Sedlan [2001] verwiesen.

⁸²Die zugrunde liegenden mathematischen Konstrukte entsprechen beispielsweise Differential- oder Integralgleichungen.

bezeichnet. Für viele technische Anwendungsfälle liefern Materialien ersten Grades ausreichend genaue Approximationen, sodass im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausschließlich diese Klasse Betrachtung findet.

Äquipräsenz: Das Äquipräsenzprinzip sagt aus, dass zur Entwicklung von Konstitutivmodellen identische Abhängigkeiten in allen Materialgleichungen enthalten sein sollten. Altenbach [2015] führt als Grund die Erkennung von Wechselwirkungen an.

Materielle Objektivität: Das in Abschnitt 2.5.1 vorgestellte Prinzip der materiellen Objektivität postuliert, dass die Materialgleichungen unabhängig (invariant) vom gewählten Bezugssystem ist, siehe [Haupt, 2002, S. 275 ff.] Dieses Axiom stellt Restriktionen an die Gestalt der Gleichungsstruktur eines Materialmodells. Das Konzept der dualen Variablen, siehe [Haupt und Tsakmakis, 1989; Haupt und Tsakmakis, 1996] und [Haupt, 2002, S. 329 ff.] stellt Richtlinien zur Definition objektiver Variablen bereit.

Physikalische Konsistenz: Die Anforderung der physikalischen Konsistenz soll die Kompatibilität des Materialmodells mit den Bilanzgleichungen ausdrücken. So darf beispielsweise die zu entwickelnde Gleichungsstruktur des Materialmodells nicht der Drehimpulsbilanz in Form der aufgezeigten Symmetrien einiger Spannungstensoren widersprechen. Darüber hinaus formuliert die Entropie-Ungleichung durch Vorgabe der Prozessrichtung Restriktionen an die konstitutiven Gleichungen. Dieses fundamentale Kriterium erlaubt die Konstruktion von thermodynamisch konsistenten Materialmodellen und wurde zuerst in den Arbeiten von Coleman und Noll [1963], Coleman [1964] und Coleman und Gurtin [1967] erfolgreich angewendet. Zur Erfüllung des zweiten Hauptsatzes in Form der Clausius-Duhem-Ungleichung haben sich zwei Vorgehensweisen herauskristallisiert. Eine erste Variante besteht in der Prüfung der thermodynamischen Nebenbedingung nach Konstruktion des Materialmodells, wobei häufig eine Verallgemeinerung auf beliebige thermomechanische Prozesse sehr schwer möglich ist. Zur Motivation eines thermodynamisch konsistenten Materialmodells wird daher in Anlehnung an Lion [2000a] und Haupt [2002] die Erfüllung der lokalen Clausius-Duhem-Ungleichung bereits während der Modellierung der Stoffgleichungen vorgeschlagen. Es erfolgt eine Anpassung der konstitutiven Beziehungen, siehe Abschnitt 2.5.3.

Neben den aufgezählten axiomatischen Anforderungen existieren eine Reihe weiterer konstitutiver Prinzipien, die es bei der Konstruktion eines Materialmodells zu berücksichtigen gilt. Exemplarisch seien das Gedächtnis eines Materials, die Berücksichtigung von richtungsabhängigen Materialeigenschaften⁸³ oder das in Betracht ziehen von kinematischen Zwangsbedingungen, wie z. B. der Inkompressibilität, erwähnt.

2.5.1 Beobachterindifferenz und materielle Objektivität

Bevor das Konzept der materiellen Objektivität erläutert werden kann, muss zunächst der Begriff der Objektivität bzw. der Beobachterindifferenz eingeführt werden. Aus Sicht

⁸³Diese Anforderung entspricht der Untersuchung von Materialsymmetrien.

der Kontinuumsmechanik existieren zwei unterschiedliche Ansätze zur Interpretation der Objektivität (aktive und passive Interpretation).⁸⁴ Im Rahmen der Kontinuumsmechanik wird mit Hilfe der sogenannten aktiven Interpretation die zeitabhängige, relative Veränderung zweier Bezugssysteme durch eine allgemeine Euklidische Transformation

$$\vec{x}^* = \mathbf{Q}(t)\vec{x} + \vec{c}(t), \quad t^* = t - a \quad (2.154)$$

ausgedrückt.⁸⁵ In Anlehnung an Holzapfel [2000] kann die koordinatenfreie Vektorgleichung, welche einen Beobachterwechsel ausdrückt, auch als eine der Momentankonfiguration überlagerten Starrkörperbewegung aufgefasst werden, siehe Abb. 2.4. Diese Sichtweise

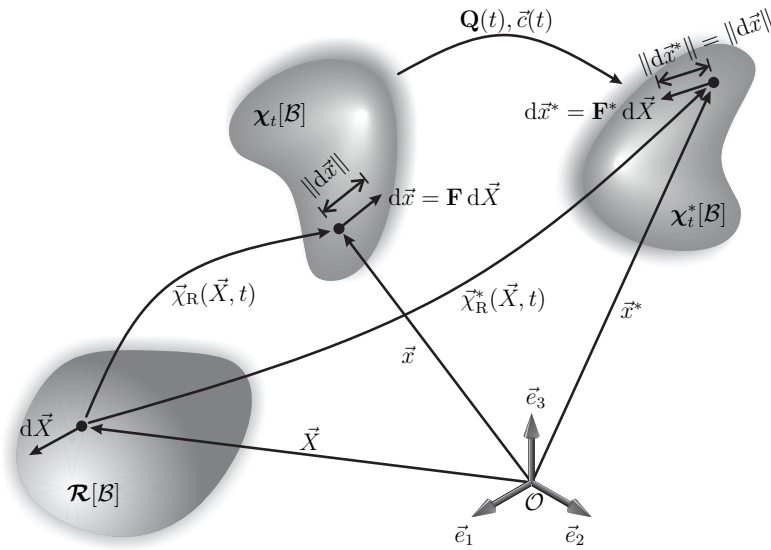


Abbildung 2.4: Darstellung von zwei Deformationsabbildungen $\chi_R(\vec{X}, t)$ und $\chi_R^*(\vec{X}, t)$, die sich durch eine überlagerte Starrkörperbewegung (2.154) unterscheiden

hat den Vorteil, dass nicht zwischen verschiedenen Bezugssystemen unterschieden werden muss. Die Starrkörperbewegung setzt sich aus einer zeitabhängigen Rotation, welche durch den orthogonalen Tensor $\mathbf{Q}(t)$, $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T$, $\det \mathbf{Q} = +1$, gekennzeichnet ist, und einem Translationsanteil $\vec{c}(t)$ zusammen. Sie überführt den in der Momentankonfiguration vorliegenden Ortsvektor \vec{x} in den Ortsvektor \vec{x}^* . Im Allgemeinen können nur auf die Momentankonfiguration bezogene Größen die Eigenschaft der Objektivität zugesprochen bekommen.

⁸⁴Innerhalb der passiven Interpretation wird der Wechsel eines Bezugssystems durch eine Koordinatentransformation herbeigeführt, siehe [Haupt, 2002, S. 159–162]. Bei der aktiven Interpretation wird die relative Bewegung zwischen zwei Bezugssystemen durch eine koordinatenfreie Vektortransformation beschrieben. Zwei Beobachter, welche in ihrem jeweiligen Ursprung des Bezugssystems angeheftet sind und sich relativ zueinander bewegen, messen dieselben Ereignisse.

⁸⁵Ein Beobachterwechsel impliziert auch einen Wechsel im Zeitmaßstab. Für eine Euklidische Transformation entspricht dies einem konstanten Zeitversatz von $a \in \mathbb{R}$. Eine sehr anschauliche Interpretation liefern zwei Beobachter, die ihre Uhren zu unterschiedlichen Zeiten gestartet haben. Für die Veranschaulichung des Objektivitätsaxioms hat der Versatz des Zeitmaßstabs keine Relevanz und wird im Folgenden ignoriert, sodass $t^* = t$ gilt.

Die skalare Größe φ , der Vektor \vec{v} und der Tensor zweiter Stufe \mathbf{A} werden als objektiv bezeichnet, wenn für beliebige Euklidische Transformationen die folgenden Gesetzmäßigkeiten

$$\varphi^* = \varphi, \quad \vec{v}^* = \mathbf{Q}(t)\vec{v}, \quad \mathbf{A}^* = \mathbf{Q}\mathbf{A}\mathbf{Q}^T \quad (2.155)$$

gültig sind.⁸⁶ Die mit einem $(\cdot)^*$ hochgestellten Variablen entsprechen Größen einer aus der überlagerten Starrkörperbewegung hervorgehenden Konfiguration. Aus Gl. (2.154) kann das Transformationsverhalten materieller Linienelemente und des Deformationsgradienten abgeleitet werden. Unter Verwendung der Kettenregel gilt:

$$d\vec{x}^* = \mathbf{F}^* d\vec{X} = \mathbf{Q}\mathbf{F} d\vec{X} = \mathbf{Q} d\vec{x} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{F}^* = \mathbf{Q}\mathbf{F} \quad (2.156)$$

Die Identität mit Gl. (2.155)₂ offenbart, dass sich der Vektor $d\vec{x}$ objektiv verhält. Der Deformationsgradient \mathbf{F} als tensorielle Größe widerspricht der Objektivitätsanforderung (2.155)₃. Die Prüfung der Objektivität kann nun analog für jede andere kinematische Größe, aufbauend auf den Definitionen (2.154) und (2.156), erfolgen, siehe [Haupt, 2002, S. 170–171]. Bei Betrachtung von vollständig auf der Referenzkonfiguration agierenden Größen, wie z. B. dem rechten Cauchy-Green Tensor \mathbf{C} , wird der Zusammenhang

$$\mathbf{C}^* = (\mathbf{F}^*)^T \mathbf{F}^* = \mathbf{F}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} \mathbf{F} = \mathbf{C} \quad (2.157)$$

ersichtlich. Aufgrund der zeitunabhängigen und von der Starrkörperbewegung unbeeinflussten Referenzkonfiguration kann das Transformationsverhalten (2.157), also die Identität $(\cdot) = (\cdot)^*$, auf alle körperbezogenen materiellen Vektoren und Tensoren übertragen werden. In der Referenzkonfiguration operierende tensorielle Größen verhalten sich demnach nicht objektiv, zeigen allerdings ein invariantes Verhalten gegenüber Euklidischen Transformationen. Das invariante Transformationsverhalten eignet sich hervorragend um Konstitutivgleichungen in einer materiellen Darstellung zu definieren, siehe Abschnitt 2.5.3. Es kann gezeigt werden, dass auf Grundlage derartiger Gleichungsstrukturen die Vortransformation der konstitutiven Beziehungen auf die Konfigurationen χ_t und χ_t^* zu einem objektiven Antwortverhalten des Materialmodells führen, siehe hierzu [Haupt, 2002, S. 279–292].

Das Prinzip der materiellen Objektivität entspricht einer Verschärfung des Objektivitätsaxioms. Haupt [2002, S. 292 ff.] fordert, dass sich die Materialeigenschaften bzw. die das Materialverhalten abbildenden Funktionale absolut invariant gegenüber einem Wechsel des Bezugssystems⁸⁷ verhalten. Des Weiteren dürfen Konstitutivgleichungen keinerlei Informationen über die Bewegung des verwendeten Bezugssystems relativ zu

⁸⁶Im Rahmen einer aktiven Interpretation charakterisieren die Transformationsgleichungen in Gl. (2.155) den Sachverhalt, dass beide Beobachter in ihrem jeweiligen Bezugssystem zu identischen Aussagen während ihrer Messungen kommen, d. h. dasselbe skalare Maß, den gleichen Vektor und den gleichen Tensor feststellen. Derartige Größen werden als objektiv bzw. als beobachter-indifferent (beobachter-invariant) bezeichnet. Exemplarisch kann für einen Abstandsvektor \vec{v} , welcher eine Differenz zwischen zwei Punkten markiert, die Transformationsbeziehung (2.155)₂ angegeben werden. Beide Beobachter messen unter Ausnutzung der Eigenschaft $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{1}$ denselben Betrag (Abstand)

$\|\vec{v}^*\| = \sqrt{\mathbf{Q}\vec{v} \cdot \mathbf{Q}\vec{v}} = \sqrt{\vec{v} \cdot \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} \vec{v}} = \|\vec{v}\|.$

⁸⁷Die Interpretation anhand eines Beobachterwechsels ist an dieser Stelle leistungsfähiger.

einem Inertialsystem enthalten. Diese aus der Erfahrung heraus getroffenen Annahmen erzeugen allerdings nicht zwangsläufig einen Widerspruch⁸⁸ in dem oben angegebenen Objektivitätsaxiom (2.155), sondern entsprechen zusätzlichen Auflagen an die Gestaltgebung der Konstitutivgleichungen. Eine Verletzung des Prinzips hat zur Folge, dass verschiedene Beobachter ein unterschiedliches Materialverhalten wahrnehmen bzw. sich infolge einer überlagerten Starrkörperbewegung der Beanspruchungszustand im Kontinuum ändert.

Unter Voraussetzung der Objektivität für den Spannungsvektor \vec{t} kann mit Hilfe des Cauchy-Theorems (2.48) und dem beobachter-indifferenten Normalenvektor \vec{n} der Nachweis für das objektive Transformationsverhalten

$$\mathbf{T}^* = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{S}^* = \mathbf{Q}\mathbf{S}\mathbf{Q}^T \quad (2.158)$$

des Cauchyschen und Kirchhoffschen Spannungstensors erbracht werden. Die materielle Zeitableitung von objektiven Tensoren zweiter Stufe

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{T}^*) = \frac{d}{dt}(\mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T) = \mathbf{Q}\dot{\mathbf{T}}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T + \mathbf{Q}\mathbf{T}\dot{\mathbf{Q}}^T, \quad (2.159)$$

hier exemplarisch anhand des Cauchyschen Spannungstensors \mathbf{T} dargestellt, führt im Allgemeinen nicht auf eine objektive Tensorrates.⁸⁹ Zur Formulierung eines ratenabhängigen Materialmodells mit Größen in der Momentankonfiguration sind objektive Spannungsraten essentiell erforderlich. Unter einer Vielzahl von Vertretern für objektive Spannungsgeschwindigkeiten seien exemplarisch die kontravariante Oldroyd-Ableitung⁹⁰

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \dot{\mathbf{S}} - \mathbf{L}\mathbf{S} - \mathbf{S}\mathbf{L}^T \quad (2.160)$$

des Kirchhoffschen Spannungstensor \mathbf{S} und dessen Jaumannsche Spannungsrates

$$\overset{\circ}{\mathbf{S}} = \dot{\mathbf{S}} - \mathbf{W}\mathbf{S} + \mathbf{S}\mathbf{W} \quad (2.161)$$

erwähnt. Beide objektive Spannungsgeschwindigkeiten beruhen auf dem Transformationsverhalten des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten

$$\mathbf{L}^* = \dot{\mathbf{F}}^* (\mathbf{F}^{-1})^* = (\mathbf{Q}\dot{\mathbf{F}} + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{F}) (\mathbf{F}^{-1}\mathbf{Q}^T) = \mathbf{Q}\dot{\mathbf{L}}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T, \quad (2.162)$$

mit dem schiefsymmetrischen Tensor $\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T$. Die additive Zerlegung (2.44) offenbart

$$\mathbf{D}^* = \mathbf{Q}\dot{\mathbf{D}}\mathbf{Q}^T \quad \text{und} \quad \mathbf{W}^* = \mathbf{Q}\dot{\mathbf{W}}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T. \quad (2.163)$$

Als Konsequenz der Gleichungen (2.162) und (2.163) lässt sich schlussfolgern, dass lediglich der Streckgeschwindigkeitstensor \mathbf{D} eine objektive Größe repräsentiert.

⁸⁸Die in Abschnitt 2.3 angegebenen räumlichen Bilanzgleichungen sind in Bezug auf ein zugrunde liegendes Inertialsystem objektiv, siehe [Haupt, 2002, S. 171–176]. Die Verallgemeinerung der Bilanz Aussagen auf ein bewegtes Bezugssystem führt dazu, dass die Bewegung des verwendeten Bezugssystems relativ zu einem Inertialsystem in Form der Absolutbeschleunigung und Absolutgeschwindigkeit einfließt. Die resultierenden Aussagen sind jedoch weiterhin objektiv.

⁸⁹Die materielle Zeitableitung $\dot{\vec{v}}^* = \mathbf{Q}\dot{\vec{v}} + \dot{\mathbf{Q}}\vec{v}$ eines objektiven Vektors \vec{v} ist ebenfalls nicht objektiv.

⁹⁰Holzapfel [2000] und Wriggers [2008] folgend kann alternativ die Beziehung $\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \mathbf{F} \left(\frac{d}{dt} \left(\mathbf{F}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{F}^{-T} \right) \right) \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \dot{\mathbf{T}} \mathbf{F}^T$ über das Konzept der Lie-Ableitung definiert werden. Hierbei entspricht der letzte Ausdruck der Vortransformation von $\dot{\mathbf{T}}$ auf die Momentankonfiguration.

2.5.2 Konzept der dualen Variablen

Nachdem in den vorhergehenden Abschnitten die wesentlichen Spannungs- und Verzerungsgrößen eingeführt worden sind, soll an dieser Stelle zur Formulierung von Materialmodellen das Konzept der dualen Variablen von Haupt und Tsakmakis [1989] vorgestellt werden, siehe auch [Haupt, 2002, S. 329 ff.] und [Haupt und Tsakmakis, 1996]. Es liefert eine physikalisch motivierte Begründung für die Verknüpfung von Spannungs- und Verzerungsgrößen sowie deren Raten in unterschiedlichen Konfigurationen und erweitert so den ursprünglich von Hill [1968] eingeführten Begriff der energetisch konjugierten Variablen. In der Originalarbeit von Haupt und Tsakmakis [1989] wird zwischen zwei Familien von Verzerrungstensen sowie den zugehörigen energetisch konjugierten Spannungen⁹¹ unterschieden. Die vorliegende Arbeit betrachtet ausschließlich die erste Familie, sodass als duales Paar in der Referenzkonfiguration der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor $\tilde{\mathbf{T}}$ und der Greensche Verzerrungstensor \mathbf{E} gewählt werden, siehe [Haupt, 2002, S. 333]. Spannungs- und Verzerrungstensen werden als dual zueinander bezeichnet, wenn die folgenden Skalarprodukte

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{E} \quad \text{Endwertarbeit} \quad (2.164)$$

$$\dot{\tilde{\mathbf{T}}} \cdot \dot{\mathbf{E}} \quad \text{inkrementelle Spannungsleistung} \quad (2.165)$$

$$\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} \quad \text{Spannungsleistung} \quad (2.166)$$

$$\dot{\tilde{\mathbf{T}}} \cdot \mathbf{E} \quad \text{komplementäre Spannungsleistung} \quad (2.167)$$

sich invariant bei einem Konfigurationswechsel verhalten. Die Ausdrücke (2.164) bis (2.167) orientieren sich dabei an energetischen Bilanzaussagen, wie sie z. B. in der Energiebilanz (2.104), in dem Prinzip von D'Alembert oder in dessen inkrementeller Formulierung, dem Prinzip der virtuellen Geschwindigkeiten, auftreten.

Als linearer Abbildungsoperator

$$(\vec{X}, t) \mapsto \Psi(\vec{X}, t), \quad \text{mit} \quad \det \Psi \neq 0, \quad (2.168)$$

transformiert das Tensorfeld Ψ in Analogie zum Deformationsgradienten (2.18) materielle Linienelemente der Referenzkonfiguration $d\vec{X}$ in materielle Linienelemente einer beliebigen Zwischenkonfiguration⁹² $d\vec{\xi}$ durch

$$d\vec{\xi} = \Psi d\vec{X}. \quad (2.169)$$

Übereinstimmend mit Gl. (2.41) lässt sich die Änderungsrate materieller Liniendifferentiale durch

$$(d\vec{\xi})' = \dot{\Psi} \Psi^{-1} d\vec{\xi} = \Lambda d\vec{\xi}, \quad \Lambda = \dot{\Psi} \Psi^{-1} \quad (2.170)$$

⁹¹Die Komponentendarstellung der Tensen in Bezug auf konvektive Koordinaten enthüllt, dass die erste Familie sich aus kovarianten Verzerrungstensen und kontravarianten Spannungstensen zusammensetzt.

⁹²Im Rahmen der Materialmodellierung ist es nützlich, Zwischenkonfigurationen einzuführen, die jedoch nicht notwendigerweise den Anforderungen der Axiome der euklidischen Geometrie genügen müssen, siehe [Haupt, 2002, S. 57 ff.]

angeben. Die auf der neuen Konfiguration operierenden Spannungs- und Verzerrungstensoren, Σ und Π sowie deren objektive Raten, resultieren aus den Vortransformationen

$$\Sigma = \Psi \tilde{T} \Psi^T, \quad (2.171)$$

$$\overset{\nabla}{\Sigma} = \Psi \dot{\tilde{T}} \Psi^T = \Psi \left(\frac{d}{dt} (\Psi^{-1} \Sigma \Psi^{-T}) \right) \Psi^T = \dot{\Sigma} - \Lambda \Sigma - \Sigma \Lambda^T, \quad (2.172)$$

$$\Pi = \Psi^{-T} \mathbf{E} \Psi^{-1}, \quad (2.173)$$

$$\overset{\Delta}{\Pi} = \Psi^{-T} \dot{\mathbf{E}} \Psi^{-1} = \Psi^{-T} \left(\frac{d}{dt} (\Psi^T \Pi \Psi) \right) \Psi^{-1} = \dot{\Pi} + \Lambda^T \Pi + \Pi \Lambda. \quad (2.174)$$

Hierbei symbolisiert $\overset{\nabla}{\Sigma}$ die kontravariante und $\overset{\Delta}{\Pi}$ die kovariante Oldroyd-Ableitung. Das Konzept der dualen Variablen impliziert nun die Identitäten

$$\tilde{T} \cdot \mathbf{E} = \Sigma \cdot \Pi, \quad \dot{\tilde{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \overset{\nabla}{\Sigma} \cdot \overset{\Delta}{\Pi}, \quad \tilde{T} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \Sigma \cdot \overset{\Delta}{\Pi}, \quad \dot{\tilde{T}} \cdot \mathbf{E} = \overset{\nabla}{\Sigma} \cdot \Pi. \quad (2.175)$$

Aufbauend auf Spannungs- und Verzerrungsmaßen in der Referenzkonfiguration schafft die Theorie eine natürliche Verbindung zwischen kinematischen und dynamischen Größen einer Zwischenkonfiguration, die mit den geforderten Invarianzeigenschaften der Skalarprodukte (2.164) bis (2.167) konform sind. Darüber hinaus liefert das Konzept passende objektive Zeitableitungen für die dualen Größen. Die spezielle Wahl von $\Psi = \mathbf{F}$ sowie $\Lambda = \mathbf{L}$ führt auf den bekannten Konfigurationswechsel von der Referenz- auf die Momentankonfiguration. Damit entsprechen die zugeordneten dualen Spannungs- und Verzerrungsmaße in der Momentankonfiguration dem Kirchhoffschen Spannungstensor \mathbf{S} , siehe Gl. (2.49), und dem Almansischen Verzerrungstensor \mathbf{A} , siehe Gl. (2.37), d. h. $\Sigma = \mathbf{S}$ und $\Pi = \mathbf{A}$. Die dualen Raten in Form von $\overset{\nabla}{\Sigma} = \overset{\nabla}{\mathbf{S}}$ und $\overset{\Delta}{\Pi} = \overset{\Delta}{\mathbf{A}}$ sind identisch mit den objektiven Oldroyd-Ableitungen der genannten Tensoren, siehe Gleichungen (2.46) und (2.160).

2.5.3 Materialmodelle

Im Rahmen einer phänomenologischen Betrachtung wird in Anlehnung an Haupt [2002] das Materialverhalten in die vier Kategorien Elastizität, Viskoelastizität, Plastizität und Viskoplastizität eingeteilt. Diese Kategorisierung in vier Materialklassen geschieht auf Basis der Prozess- bzw. Geschwindigkeitsabhängigkeit des Werkstoff-Antwortverhaltens. Nach Haupt [1996] folgt unter Berücksichtigung der allgemeinen Konzepte der Materialtheorie das thermomechanische Spannungsfunktional

$$\tilde{T}(t) = \mathfrak{F}_{\tau \leq t} [\mathbf{E}(\tau), \Theta(\tau)] \quad (2.176)$$

des einfachen Materials. Die sogenannte reduzierte Form (2.176) des einfachen Materials beschreibt die zeitveränderliche Spannungsantwort $\tilde{T}(t)$ eines materiellen Punktes als ein Funktional in Abhängigkeit der vergangenen Geschichte des Greenschen Verzerrungstensors \mathbf{E} und der Temperatur Θ .⁹³ Unter Berücksichtigung einer Temperaturabhängigkeit

⁹³Alternativ zum Greenschen Verzerrungstensor \mathbf{E} kann zur Formulierung des Funktionals (2.176) auch jeder andere auf der Referenzkonfiguration operierende Streck- oder Deformationstensor, wie z. B. \mathbf{U} oder \mathbf{C} , herangezogen werden. Die Prozessabhängigkeit der Temperatur Θ schließt auch die Abhängigkeit des Gradienten $\text{Grad } \Theta$ ein.

der Materialeigenschaften müssen weitere konstitutive Beziehungen in Form von funktionalen Zusammenhängen, wie z. B. für die innere Energie, die Entropie und den Wärmefluss, angegeben werden.

Der zeitliche Operator \mathfrak{F} zur Beschreibung eines inelastischen Werkstoffverhaltens⁹⁴ kann einerseits explizit in Gestalt von Integralgleichungen oder implizit durch gewöhnliche Differentialgleichungen aufgestellt werden. Der Fokus der vorliegenden Arbeit liegt ausschließlich auf dem zweiten Konzept, welches auf Materialmodelle vom Evolutionsgleichungstyp führt. Hiernach wird die funktionelle Beziehung für den Spannungszustand (2.177) durch zusätzliche gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung, sogenannte Entwicklungs- bzw. Evolutionsgleichungen, für die inneren Variablen \mathbf{q} komplettiert (Theorie der inneren Variablen). Die Gleichungsstruktur für den mechanischen Anteil der Konstitutivbeziehungen lautet:

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\Phi}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q}), \quad (2.177)$$

$$\dot{\mathbf{q}} = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q}) \quad (2.178)$$

Die inneren Variablen werden durch ein Tupel, $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{n_q}$, zusammengefasst und können tensorielle, vektorielle oder skalare Größen repräsentieren. Die Anzahl aller Komponenten von \mathbf{q} ist durch n_q festgelegt.

Für die vorliegende Arbeit ist die Vorstellung einer Reihe von Konstitutivmodellen aus unterschiedlichen Materialklassen erforderlich, die jedoch alle einem einheitlichen Modellierungskonzept zur Erfüllung der konstitutiven Prinzipien aus Abschnitt 2.5 folgen und identische Annahmen an Materialeigenschaften stellen. Diese Gemeinsamkeiten sollen in der nachfolgenden Aufzählung zum Ausdruck gebracht werden.

Theorie der inneren Variablen: Alle inelastischen Materialmodelle in den nachfolgenden Abschnitten 2.5.3.2, 2.5.3.3, 2.5.3.5 und 2.5.3.7 basieren auf dem Konzept der inneren Variablen. Die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen (2.178) beeinflussen die Materialantwort, sodass der Einfluss der Prozessgeschichte und die wichtigsten phänomenologischen Beobachtungen wiedergegeben werden. Zur kontinuumsmechanischen Beschreibung inelastischer Effekte existieren in der Fachliteratur eine Reihe von Modellansätzen, die beispielsweise auf Konstitutivmodelle mit Evolutionsgleichungen vom Spannungs- oder Dehnungstyp führen, siehe z. B. [Coleman und Gurtin, 1967].

Modellierungskonzept: Ausgehend von einem eindimensionalen rheologischen Modell wird die allgemeine Struktur der Konstitutivgleichungen herausgearbeitet. Aus Sicht des Autors existieren dabei zwei Vorgehensweisen. Zum einen kann die Gleichungsstruktur der einaxialen Ersatzmodelle vergleichsweise einfach auf dreidimensionale Problemstellungen unter Beachtung geometrischer und physikalischer Nichtlinearitäten erweitert werden, siehe Abschnitt 2.5.3.5. Die Kompatibilität der verallgemeinerten Stoffgleichungen mit der Entropieungleichung wird jedoch nicht garantiert. Alternativ kann für das rheologische Modell eine konstitutiv

⁹⁴Im Fall der Elastizität reduziert sich das Funktional für den Spannungszustand auf eine algebraische Funktion.

bedingte Zerlegung der Kinematik und eine Helmholtz-Energie (freie Energie) postuliert werden. In Verbindung mit einer deduktiven Herangehensweise wird die Verträglichkeit mit dem Dissipationsprinzip der Thermodynamik überprüft und die Struktur von möglichen Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen festgelegt.

Thermodynamische Konsistenz: Auf Basis einer a priori Erfüllung der lokalen Dissipationsungleichung, siehe Gleichungen (2.119) und (2.120), wird ein Satz von thermodynamisch konsistenten Konstitutivbeziehungen formuliert, die für beliebige thermomechanische Prozesse gelten. Stellvertretend hierfür seien die Pionierarbeiten von Coleman und Noll [1963], Coleman [1964] und Coleman und Gurtin [1967] erwähnt.

Materielle Objektivität: Die reduzierte Form (2.176) des einfachen Materials, also eine Darstellung der Spannungsbeziehung (2.177) auf der Referenzkonfiguration, gewährleistet a priori das Prinzip der materiellen Objektivität, siehe Abschnitt 2.5.1. Dies impliziert an die inneren Variablen die Restriktion, dass die Entwicklungsgleichungen (2.178) ebenfalls in Bezug auf die Referenzkonfiguration formuliert werden müssen.⁹⁵ Die in der vorliegenden Arbeit präsentierten geometrisch nicht-linearen Materialmodelle gehören allesamt dieser Kategorie an. Darüber hinaus hat die materielle Darstellung der Konstitutivbeziehungen (2.177) und (2.178) den fundamentalen Vorteil, dass keine speziellen inkrementell objektiven Zeitintegrationsverfahren, siehe hierzu [Hughes und Winget, 1980; Nagtegaal, 1982; Rubinstein und Atluri, 1983; Pinsky et al., 1983; Reed und Atluri, 1985; Weber et al., 1990; Weber und Anand, 1990; Healy und Dodds, 1992; Fish und Shek, 1999; Simo und Hughes, 1998; Seifert et al., 2007; Seifert und Maier, 2008], wie sie für räumlich formulierte ratenabhängige Stoffgleichungen Anwendung finden, zur Zeitdiskretisierung des Spannungsalgorithmus benötigt werden.

Homogene, isotrope Materialien: Es wird ausschließlich isotropes (richtungsunabhängiges) Materialverhalten von homogenen Körpern betrachtet. Die Berücksichtigung einer Richtungsabhängigkeit (Anisotropie) eines Kontinuums im Zusammenhang mit dem dargestellten Modellierungskontext ist z. B. in [Ogden, 2009] und der dort zitierten Literatur nachzulesen.

Im Rahmen einer thermodynamisch konsistenten Materialmodellierung ist die Definition einer Konstitutivbeziehung für den Wärmestromvektor \vec{q} erforderlich, welche eine Verbindung zwischen dem Wärmestromvektor \vec{q} und dem räumlichen Temperaturgradient $\text{grad } \Theta$ herstellt. Hierfür wird das Fouriersche Wärmeleitungsgesetz

$$\vec{q} = -\kappa \text{grad } \Theta, \quad (2.179)$$

mit der temperaturveränderlichen Wärmeleitfähigkeit $\kappa = \hat{\kappa}(\Theta)$, verwendet. Aus der Transformationsvorschrift $\text{grad } \Theta = \mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \Theta$ und Gl. (2.56) folgt die materielle

⁹⁵Eine Darstellung von Konstitutivbeziehungen auf Basis von räumlichen Größen und räumlich objektiven Zeitableitungen wird nicht in der vorliegenden Arbeit verfolgt. Diese werden in [Simo und Pister, 1984; Simo und Hughes, 1998] und der dort zitierten Literatur behandelt.

Darstellung des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes

$$\vec{q}_R = -\kappa_R \text{Grad } \Theta, \quad (2.180)$$

wobei nun die Wärmeleitfähigkeit

$$\kappa_R = \hat{\kappa}(\Theta)(\det \mathbf{F})\mathbf{C}^{-1} \quad (2.181)$$

einen von der Deformation abhängigen positiv definiten Tensor zweiter Stufe für $\hat{\kappa}(\Theta) > 0$ kennzeichnet. Des Weiteren kann durch die Vorgabe einer Helmholtz-Energie (freie Energie) $\hat{\psi}$ und die Ableitung einer weiteren Konstitutivbeziehung für die spezifische Entropie s , welche ebenfalls aus der Forderung einer positiven Entropieproduktion hervorgeht, die lokale Energiebilanz (2.104) in die verallgemeinerte Wärmeleitungsgleichung

$$c_p \dot{\Theta} = -\frac{1}{\varrho_R} \text{Div } \vec{q}_R + r_\Theta + p_\Theta \quad (2.182)$$

überführt werden. Hierbei kennzeichnen

$$c_p = \hat{c}_p(J, \Theta) \quad (2.183)$$

eine als deformationsabhängig angenommene spezifische Wärmekapazitätsfunktion und

$$p_\Theta = \hat{p}_\Theta(\mathbf{E}, \dot{\mathbf{E}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (2.184)$$

einen Wärmeproduktionsterm aufgrund interner Dissipationsmechanismen. Um ein möglichst breites Modellierungsspektrum zur Abbildung von dissipativen Phänomenen und anderer thermomechanischer Kopplungseffekte ausschöpfen zu können, wird p_Θ allgemein als Funktion der inneren Variablen $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{n_q}$ und deren Zeitableitungen $\dot{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^{n_q}$ aufgestellt. Die genauere Spezifikation der mechanischen und thermischen Materialfunktionen erfolgt im jeweiligen Abschnitt zu den Materialmodellen. Um eine Zuordnung der Materialparameter bzw. Materialkonstanten zu den Stoffmodellen zu ermöglichen, werden diese in den nachfolgenden Abschnitten 2.5.3.1 bis 2.5.3.7 in blauer Schrift ausgezeichnet.

Im Rahmen der geometrisch linearen Theorie, siehe Abschnitt 2.4, wird der mechanische Anteil des Konstitutivmodells durch die Gleichungsstruktur

$$\mathbf{T} = \mathbf{h}(\mathbf{E}_L, \Theta, \mathbf{q}), \quad (2.185)$$

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{r}(\mathbf{E}_L, \Theta, \mathbf{q}) \quad (2.186)$$

zusammengefasst. In der impliziten Darstellung des Stofffunktionals (2.185) und (2.186) kennzeichnen die Funktionen \mathbf{h} und \mathbf{r} gültige Abbildungen im Bereich kleiner Deformationen. Des Weiteren ist es erforderlich, innerhalb der geometrisch linearen Theorie, Gl. (2.182) unter Ausnutzung des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes (2.179) auf die Form

$$c_p \dot{\Theta} = -\frac{1}{\varrho} \text{div } \vec{q} + r_\Theta + p_\Theta, \quad (2.187)$$

mit

$$c_p = \hat{c}_p(\varepsilon_{Lv}, \Theta) \quad \text{und} \quad p_\Theta = \hat{p}_\Theta(\mathbf{E}_L, \dot{\mathbf{E}}_L, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), \quad (2.188)$$

zu adaptieren.

2.5.3.1 Hyperelastizität

Die umfassende Theorie der finiten Hyperelastizität kann als eine erste Näherung zur Modellierung von isotropen und anisotropen Elastomerwerkstoffen herangezogen werden. Im Rahmen der Arbeit werden nur ausgewählte Aspekte tangiert, sodass für eine ausführliche Darstellung stellvertretend auf die Standardwerke von Truesdell und Noll [1965a], Atkin und Fox [1980], Ogden [1984], Marsden und Hughes [1994] und Haupt [2002] verwiesen wird. Ausgangspunkt für die Formulierung eines thermodynamisch konsistenten Materialmodells ist die Wahl einer freien Energie.⁹⁶ Zur Generierung isotroper Tensorfunktionen in den Spannungen kann die Verzerrungsenergie eine Invarianten- oder Eigenwertdarstellung von einem der in Abschnitt 2.1.3 aufgeführten symmetrischen Deformationsmaße annehmen. Zum Zweck einer spezifischeren Darstellung soll die Formänderungsenergie $\tilde{\psi}(\mathbf{C})$ im Folgenden nur noch als Funktion des rechten Cauchy-Green Tensors \mathbf{C} bzw. hiervon abgeleiteten Größen veranschaulicht werden. Aus der Historie heraus haben sich Materialmodelle der Hyperelastizität vorwiegend unter der Annahme der Inkompressibilität entwickelt, da hierfür zahlreiche analytische Lösungen spezieller Randwertprobleme existieren. Diese Idealisierung muss jedoch fallen gelassen werden, sobald für das gummiartige Material nicht zu vernachlässigende Volumendehnungen nachgewiesen werden. Zudem bedingt die numerische Umsetzung der Inkompressibilitätsannahme mit Hilfe der Methode der finiten Elemente zusätzliche Schwierigkeiten, die in der Erfüllung der Zwangsbedingung begründet liegen.⁹⁷ Die Annahme der Nahezu-Inkompressibilität entspricht daher einem adäquaten Hilfsmittel, um die Modellierungs- bzw. Numerikprobleme zu umgehen. Für schwach-inkompressible, hyperelastische Materialien ist es üblich, einen aus zwei Energieanteilen bestehenden Ansatz der Form

$$\tilde{\psi}(\mathbf{C}) = \bar{\psi}(J, \bar{\mathbf{C}}) = U(J) + \bar{v}(\bar{\mathbf{C}}) \quad (2.189)$$

zu verwenden. Der erste Beitrag $U(J)$ resultiert aus der volumenändernden Deformation (2.31), $J = \det \mathbf{F}$, und der zweite Anteil $\bar{v}(\bar{\mathbf{C}})$ aus der volumenerhaltenden Deformation (isochore Deformation), die durch den unimodularen rechten Cauchy-Green Tensor $\bar{\mathbf{C}}$ gekennzeichnet ist, siehe hierzu [Hartmann, 2003]. Nach Spezifikation der Verzerrungsenergie stehen sämtliche Information für die Berechnung des resultierenden Spannungszustands zur Verfügung. Aus der Erfüllung der Entropieungleichung (2.120) für beliebige isotherme Prozesse folgt für ein hyperelastisches Material die allgemeine Definition:

$$\tilde{\mathbf{T}} = 2 \frac{d\tilde{\psi}(\mathbf{C})}{d\mathbf{C}} = \frac{d\tilde{\psi}(\mathbf{E})}{d\mathbf{E}} \quad (2.190)$$

In Bezug auf den volumetrischen Anteil $U(J)$ der Formänderungsenergie existieren in der Literatur, siehe z. B. [Hartmann, 2003; Doll und Schweizerhof, 2000], eine Vielzahl

⁹⁶In einem rein mechanischen Kontext wird die Helmholtz-Energie (freie Energie) $\tilde{\psi}$ auch als spezifische Formänderungs- oder Verzerrungsenergie bezeichnet. Entgegen Abschnitt 2.3.5 erfolgt hier eine Definition der spezifischen Formänderungsenergie $\tilde{\psi}$ als eine volumetrische Energiedichte bezogen auf eine Volumeneinheit in der Referenzkonfiguration, d. h. es gilt $\tilde{\psi} = \varrho_R \hat{\psi}$. Dies hat den Vorteil, dass den Materialparametern in Tab. 2.6 die Dimension einer Spannung zugeordnet werden kann.

⁹⁷Inkompressibles Materialverhalten impliziert die Zwangsbedingung $J - 1 = 0$, welche im Rahmen der Methode der finiten Elemente beispielsweise mit Hilfe der Lagrange-Multiplikator-Methode oder der Penalty-Methode umgesetzt werden kann.

von Vorschlägen, die sich jedoch nicht alle als physikalisch sinnvoll erweisen. Die Ansätze werden häufig nach mathematischen Gesichtspunkten gewählt, siehe z. B. [Hartmann, 2003, S. 76–78]. Vertiefende wissenschaftliche Diskussionen zu diesem Themengebiet sind in den Aufsätzen von Ogden [1972], Simo und Taylor [1982], Simo et al. [1985a], Ehlers und Eipper [1998], Simo und Taylor [1991], Miehe [1994], Liu et al. [1994] und Hartmann und Neff [2003] und der dort zitierten Literatur zu finden. Für kompakte Auflistung zu verschiedenen Modellierungsansätzen von $U(J)$ sei auch auf [Doll und Schweizerhof, 2000] verwiesen. In Tab. 2.5 sind die relevanten Ansätze für die später

Tabelle 2.5: Volumetrischer Anteil der Formänderungsenergie

Nr.	$\hat{U}(J)$	Referenz
1	$\frac{1}{2}(J-1)^2$	-
2	$\frac{1}{50}(J^5 - J^{-5} - 2)$	[Hartmann und Neff, 2003]

durchgeführten numerischen Untersuchungen in Verbindung mit einem Materialmodell der Hyperelastizität zusammengefasst. Unter Verwendung des Kompressionsmoduls K wird von der Struktur

$$U(J) = K\hat{U}(J) \quad (2.191)$$

ausgegangen. Die erste Variante in Tab. 2.5 kennzeichnet ein mit Schwächen behaftetes Modell, welches jedoch in sehr vielen kommerziellen Finite-Elemente-Programmen implementiert ist. Es wird daher häufig zu Verifikationszwecken herangezogen. Das zweite Modell weist spezielle Stabilitätseigenschaften auf und wird ausführlich in [Hartmann und Neff, 2003] beschrieben.

Die Wahl des isochoren Anteils der Formänderungsenergie $\bar{v}(\bar{\mathbf{C}})$ kann prinzipiell auf jede freie Energie fallen, welche ursprünglich für inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten entwickelt wurde. Zur Berücksichtigung der gestaltändernden Deformation müssen lediglich die Abhängigkeiten der originalen Deformationsmaße in den skalaren Funktionen durch identische Abhängigkeiten der unimodularen Größen (2.33) ersetzt werden. In der vorliegenden Arbeit liegt jedoch die Beschränkung auf dem modifizierten Polynomansatz nach Rivlin und Saunders [1951],

$$\bar{v}(\bar{\mathbf{C}}) = \bar{w}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n c_{ij} (\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3)^i (\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3)^j, \quad (2.192)$$

der die Formänderungsenergie als ein Polynom in der ersten und zweiten Hauptinvarianten,⁹⁸ $\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}$ und $\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}$, des unimodularen rechten Cauchy-Green Tensors $\bar{\mathbf{C}}$ betrachtet. Hierbei symbolisieren die Konstanten c_{ij} die Materialparameter. Die Tabelle 2.6 fasst die

⁹⁸Die Hauptinvarianten $\mathbf{I}_{\mathbf{C}}$, $\mathbf{II}_{\mathbf{C}}$ und $\mathbf{III}_{\mathbf{C}}$ eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{C} lauten: $\mathbf{I}_{\mathbf{C}} = \text{tr } \mathbf{C}$, $\mathbf{II}_{\mathbf{C}} = \frac{1}{2} ((\text{tr } \mathbf{C})^2 - \text{tr}(\mathbf{C}^2))$, $\mathbf{III}_{\mathbf{C}} = \det \mathbf{C}$

Tabelle 2.6: Isochorer Anteil der Formänderungsenergie

Nr.	$\bar{w}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}})$	Referenz
1	$c_{10}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3)$	[Rivlin, 1948]
2	$c_{10}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3) + c_{01}(\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3)$	[Mooney, 1940; Rivlin, 1948]
3	$c_{10}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3) + c_{01}(\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3) + c_{30}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} - 3)^3$	[Hartmann, 2001b]

für die Arbeit relevanten Modelle zusammen.

Die aus der spezifischen Aufteilung der Verzerrungsenergie (2.189) hervorgehende Spannungsbeziehung nimmt in der Referenzkonfiguration die Gestalt

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{T}} &= JU'(J)\mathbf{C}^{-1} + 2J^{-2/3} \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3}\bar{\mathbf{C}}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{C}} \right] \frac{d\bar{w}}{d\bar{\mathbf{C}}} \\ &= J^{1/3}U'(J)\bar{\mathbf{C}}^{-1} + 2J^{-2/3} \left((w_1 + w_2\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}})\mathbf{1} - w_2\bar{\mathbf{C}} - \frac{1}{3}(w_1\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} + 2w_2\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}})\bar{\mathbf{C}}^{-1} \right), \\ \text{mit } \frac{d\bar{w}}{d\bar{\mathbf{C}}} &= w_1 \frac{d\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}}{d\bar{\mathbf{C}}} + w_2 \frac{d\mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}}{d\bar{\mathbf{C}}}, \quad w_1(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial \bar{w}}{\partial \mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}} \quad \text{und} \quad w_2(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial \bar{w}}{\partial \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}}\end{aligned}\tag{2.193}$$

an.⁹⁹ Die Vortransformation des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors $\tilde{\mathbf{T}}$ auf den Cauchyschen Spannungstensor \mathbf{T} in der Momentankonfiguration unter Verwendung des Push-Forward-Operators¹⁰⁰

$$\mathcal{F} = [\mathbf{F} \otimes \mathbf{F}]^{T_{23}}\tag{2.194}$$

führt auf den Ausdruck

$$\begin{aligned}\mathbf{T} &= \frac{1}{J}\mathcal{F}\tilde{\mathbf{T}} = \frac{1}{J}[\mathbf{F} \otimes \mathbf{F}]^{T_{23}}\tilde{\mathbf{T}} = \frac{1}{J}\mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}}\mathbf{F}^T \\ &= U'(J)\mathbf{1} + \frac{2}{J} \left((w_1 + w_2\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{B}}})\bar{\mathbf{B}}^D - w_2(\bar{\mathbf{B}}^2)^D \right).\end{aligned}\tag{2.195}$$

Eine direkte Konsequenz der spezifischen Aufteilung der Verzerrungsenergie (2.189) ist die Zerlegung von \mathbf{T} in einen reinen Kugel- und Deviatoranteil.¹⁰¹

⁹⁹Für eine koordinatenfreie Darstellung von tensoriellen Gleichungen werden in Anlehnung an Ehlers [1993] und Hartmann [2003] Tensoren vierter Stufe als Hilfsmittel eingesetzt. Beispielsweise repräsentiert in Gl. (2.193) $\mathcal{I} = [\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}]^{T_{23}}$ den sogenannten Einheitstensor vierter Stufe, von dessen charakteristischen Transformationseigenschaft $\mathcal{I}\mathbf{A} = [\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}]^{T_{23}}\mathbf{A} = \mathbf{1}\mathbf{A}\mathbf{1}^T = \mathbf{A}$, bei Anwendung von \mathcal{I} auf einen beliebigen Tensor zweiter Stufe \mathbf{A} , sich der spezifische Name ableitet.

¹⁰⁰Zur Repräsentation des Push-Forward-Operators $[\mathbf{F} \otimes \mathbf{F}]^{T_{23}}$ wird von einer speziellen in [Ehlers, 1993; Hartmann, 2003] vorgeschlagenen Transpositionsregel für Tensoren vierter Stufe Gebrauch gemacht. Bei Anwendung eines solchen aus zwei Tensoren zweiter Stufe, \mathbf{A} und \mathbf{B} , definierten Operators $[\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}]^{T_{23}}$ auf einen weiteren Tensor zweiter Stufe \mathbf{C} gilt $[\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}]^{T_{23}}\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{B}^T$. Für zusätzliche Details zu Transpositionsregeln von Tensoren höherer Stufe sollte [De Boer, 1982] konsultiert werden.

¹⁰¹Jeder Tensor zweiter Stufe \mathbf{A} kann in Form einer additiven Zerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{A}^H + \mathbf{A}^D$ in einen Kugelanteil $\mathbf{A}^H = 1/3(\text{tr } \mathbf{A})\mathbf{1}$ und einen deviatorischen Anteil $\mathbf{A}^D = \mathbf{A} - \mathbf{A}^H = \mathbf{A} - 1/3(\text{tr } \mathbf{A})\mathbf{1}$ aufgespalten werden.

Für die Bildung des Tangentenoperators in der Referenzkonfiguration

$$\tilde{\mathcal{C}} = 2 \frac{d\tilde{\mathbf{T}}}{d\mathbf{C}} = 4 \frac{d^2\tilde{\psi}}{d\mathbf{C} d\mathbf{C}} \quad (2.196)$$

bzw. des Tangentenoperators in der Momentankonfiguration

$$\mathcal{C} = \frac{1}{J} \mathcal{F} \tilde{\mathcal{C}} \mathcal{F}^T = \frac{1}{J} [\mathbf{F} \otimes \mathbf{F}]^{T_{23}} \tilde{\mathcal{C}} [\mathbf{F}^T \otimes \mathbf{F}^T]^{T_{23}}, \quad (2.197)$$

die in Hinblick auf den Linearisierungsprozess im Rahmen der Methode der finiten Elemente benötigt werden, wird auf [Hartmann, 2003] referiert. Tabelle 2.7 fasst den

Tabelle 2.7: Zusammenstellung der konstitutiven Beziehungen für das Materialmodell der Hyperelastizität bei Nahezu-Inkompressibilität bezogen auf die Referenzkonfiguration

Freie Energie	
$\bar{\psi}(J, \bar{\mathbf{C}}) = U(J) + \bar{w}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}})$	(Gl. (2.189), Tab. 2.5, Tab. 2.6)
Spannungsbeziehung in der Referenzkonfiguration	
$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}} &= 2 \frac{d\tilde{\psi}(\mathbf{C})}{d\mathbf{C}} = 2 \frac{d}{d\mathbf{C}} \bar{\psi}(J(\mathbf{C}), \bar{\mathbf{C}}(\mathbf{C})) \\ &= \tilde{\mathbf{T}}^{\text{vol}} + \tilde{\mathbf{T}}^{\text{iso}} \\ &= JU'(J)\mathbf{C}^{-1} + 2J^{-2/3} \left((w_1 + w_2 \mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}})\mathbf{1} - w_2 \bar{\mathbf{C}} - \frac{1}{3}(w_1 \mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}} + 2w_2 \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}})\bar{\mathbf{C}}^{-1} \right) \end{aligned}$	(2.193)
Abkürzungen	
$w_1(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial \bar{w}}{\partial \mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}}, \quad w_2(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial \bar{w}}{\partial \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}}}$	

Spannungsalgorithmus bezogen auf die Referenzkonfiguration noch einmal zusammen.

2.5.3.2 Finite Viskoelastizität

Ratenabhängige Spannungsfunktionale im Bereich der Viskoelastizität zur Wiedergabe von schwindenden Gedächtniseigenschaften des Materials können einerseits als Integralgleichungen oder implizit über das Konzept der inneren Variablen nachgebildet werden, vgl. [Haupt, 2002, Kap. 10]. Im folgenden Abschnitt wird in Kurzform ein in [Hartmann, 2002] entwickeltes Materialmodell der finiten Viskoelastizität, siehe hierzu auch [Lubliner, 1985; Simo, 1987; Govindjee und Reese, 1997; Reese und Govindjee, 1998a; Haupt und

Sedlan, 2001; Sedlan, 2001; Lion, 2000a; Hartmann, 2002; Hartmann, 2003; Hartmann und Hamkar, 2010; Hamkar, 2013], für isotherme Prozesse vorgestellt, welches auf dem zuletzt genannten Konzept basiert. Zur Motivation der Grundstruktur der geschwindigkeitsabhängigen Materialbeschreibung bei großen Deformationen ist es zweckmäßig, ein rheologisches Ersatzmodell gemäß Abb. 2.5, bestehend aus elastischen Feder- und

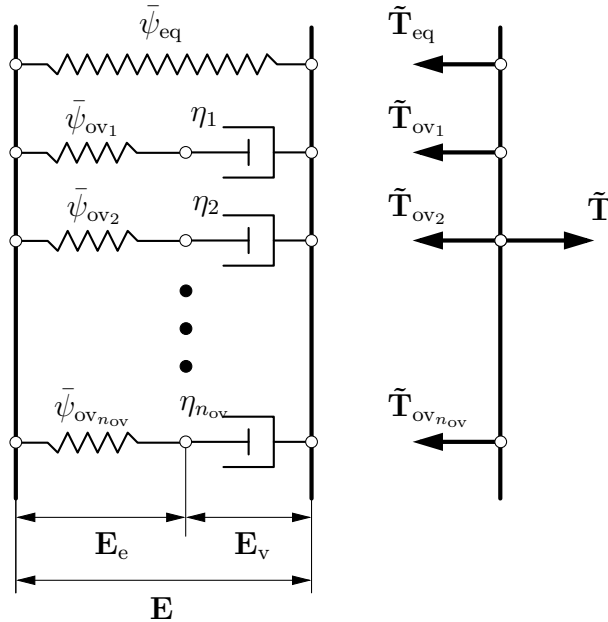


Abbildung 2.5: Rheologisches Modell der finiten Viskoelastizität

viskosen bzw. dissipativen Dämpferelementen, zu verwenden. Das aus der Materialklasse der linearen Viskoelastizität auf finite Deformationen übertragene rheologische Ersatzschaltbild¹⁰² entspricht der Parallelschaltung von n_{ov} nichtlinearen Maxwell-Elementen¹⁰³ und einer einzelnen dazu parallel geschalteten Feder. Um den Aufwand bei der Auswahl eines physikalisch sinnvollen Satz an Materialparametern für das behandelte Konstitutivmodell zu reduzieren, soll zur Wiedergabe der nichtlinearen geschwindigkeitsabhängigen Phänomene für die folgenden Ausführungen nur ein Maxwell-Element verwendet werden, d. h. $n_{ov} = 1$.

Die den Federn zugeordneten Formänderungsenergien motivieren gemäß Gl. (2.198) eine Aufspaltung der freien Energie $\bar{\psi}$ in einen Gleichgewichtsanteil $\bar{\psi}_{eq}$ und einen Energieanteil $\bar{\psi}_{ov}$. Für die Modellierung der Verzerrungsenergie $\bar{\psi}_{eq}$ der nichtlinearen Feder wird in Anlehnung an Abschnitt 2.5.3.1 ein Ansatz der Hyperelastizität bei Nahezu-Inkompressibilität gewählt. Die in der vorliegenden Arbeit relevanten volumetrischen und isochoren Verzerrungsenergiefunktionen, $U(J)$ und $\bar{w}_{eq}(I_{\bar{C}}, II_{\bar{C}})$, können den Tabellen 2.5 und 2.6 entnommen werden. Nach Festlegung der geometrisch nichtlinearen Kinematik für die einzelnen Maxwell-Elemente, welche aus einer elastisch-viskosen Zerlegung der

¹⁰²Das rheologische Modell wird in der einschlägigen Fachliteratur als Dreiparameter-Modell der linearen Viskoelastizität bezeichnet, siehe auch Abschnitt 2.5.3.5.

¹⁰³Ein Maxwell-Element setzt sich aus einer Feder und einem Dämpfer zusammen, welche in Reihe geschaltet sind.

volumenerhaltenden Deformation resultiert,¹⁰⁴ wird die Formänderungsenergie $\bar{w}_{ov}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}_e})$ in den Federn der Maxwell-Elemente in Gestalt des isotropen Neo-Hooke-Typs (2.199) präzisiert.¹⁰⁵ Hierbei repräsentiert $\bar{\mathbf{C}}_e$ den auf einer fiktiven, inelastischen (viskosen) Zwischenkonfiguration operierenden unimodularen, elastischen rechten Cauchy-Green Deformationstensor. Dessen erste Hauptinvariante symbolisiert $\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}_e}$.¹⁰⁶

Darüber hinaus assoziiert die vorgegebene rheologische Modellstruktur eine additive Zerlegung des Spannungszustands gemäß Gl. (2.200) in ratenunabhängige Gleichgewichtsspannungen $\bar{\mathbf{T}}_{eq}$ und ratenabhängige Überspannungen $\bar{\mathbf{T}}_{ov}$, siehe hierzu auch Arbeiten von Lubliner [1985], Haupt und Sedlan [2001], Sedlan [2001], Lion [2000a] und Hamkar [2013] und die dort zitierte Literatur. Die Erfüllung der Dissipationsungleichung (2.120) für beliebige isotherme Prozesse führt unter Berücksichtigung der getroffenen Annahmen auf die zu definierenden konstitutiven Beziehungen in der Referenzkonfiguration, d. h. auf die Spannungsbeziehungen (2.201) bis (2.203) und die Entwicklungsgleichungen bzw. Fließregel (2.204) für die inneren Variablen $\mathbf{q} = \mathbf{C}_v$ vom Deformationstyp. Geeignete Pull-Back-Operationen und das Ausnutzen von Isotropieeigenschaften ermöglichen es, alle Materialgleichungen und die abhängigen Größen in Bezug auf die Referenzkonfiguration zu formulieren. Als Folge ergeben sich tensorwertige Evolutionsgleichungen für die viskosen Verzerrungen \mathbf{C}_v der Referenzkonfiguration. Eine detaillierte Darstellung der einzelnen Umformungen ist in [Hartmann, 2002; Hartmann, 2003; Hamkar, 2013] zu finden. Die jedem Dämpfer aus Abb. 2.5 zugeordnete positive Viskositätsfunktion η entspricht einem Proportionalitätsfaktor zur Formulierung einer dissipativen Fließregel, die mit dem zweiten Hauptsatz verträglich ist. Als wesentlicher Teil der Inelastizität des Materialmodells wird eine Viskositätsfunktion gemäß Gl. (2.205) postuliert, die eine nichtlineare Raten- bzw. Prozessabhängigkeit ausdrückt. Das gesamte, mit Größen der Referenzkonfiguration formulierte Konstitutivmodell ist in Tab. 2.8 zusammengefasst.

2.5.3.3 Finite Viskoplastizität

In diesem Abschnitt sollen die wesentlichsten Details des in [Quint, 2007] vorgestellten Viskoplastizitätsmodells für finite Deformationen, welches auf den in [Lion, 2000c; Tsakmakis und Willuweit, 2004] gemachten Modellierungsvorschlägen basiert, resümiert werden, vgl. hierzu auch [Quint und Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2008a]. Das Konstitutivmodell eignet sich für die Modellierung des inelastischen Materialverhaltens im Rahmen der Metallplastizität bei isothermen, finiten Deformationsprozessen, welches beispielsweise im Bereich der Metallumformung vorkommt.

¹⁰⁴Infolge der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten gelingt es additive Dekompositionen des Greenschen Verzerrungstensors $\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_v$ herbeizuführen, siehe Abb. 2.5, die einen direkten Bezug zum Dreiparameter-Modell der linearen Viskoelastizität herstellen. Es sei angemerkt, dass der in Abb. 2.5 dargestellte elastische Verzerrungstensor \mathbf{E}_e auch Anteile der volumenändernden Deformation enthält. Diese sind jedoch bei der Formulierung von $\bar{\psi}_{ov}$ nicht von Interesse.

¹⁰⁵Der auf die Arbeit von Lion [2000a] zurückgehende Ansatz für \bar{w}_{ov} führt auf sich rein deviatorisch entwickelnde Cauchy-Überspannungen und eine deviatorische Fließregel für die inneren Variablen in der Momentankonfiguration.

¹⁰⁶Eine detaillierte Beschreibung der kinematischen Zerlegung des Deformationsgradienten und der hieraus resultierenden Deformations- und Verzerrungstensoren sowie die für eine Ratenformulierung notwendigen Größen können [Hartmann, 2003; Hamkar, 2013] entnommen werden.

Tabelle 2.8: Zusammenstellung der konstitutiven Beziehungen für das in [Hartmann, 2003] entwickelte Materialmodell der finiten Viskoelastizität mit Variablen in der Referenzkonfiguration

Freie Energie	
$\bar{\psi}(J, \bar{\mathbf{C}}, \bar{\mathbf{C}}_e) = \bar{\psi}_{\text{eq}}(J, \bar{\mathbf{C}}) + \bar{\psi}_{\text{ov}}(\bar{\mathbf{C}}_e) = U(J) + \bar{v}_{\text{eq}}(\bar{\mathbf{C}}) + \bar{v}_{\text{ov}}(\bar{\mathbf{C}}_e)$	(2.198)
$= U(J) + \bar{w}_{\text{eq}}(\text{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) + \bar{w}_{\text{ov}}(\text{I}_{\bar{\mathbf{C}}_e})$	(Tab. 2.5, Tab. 2.6)
$\bar{w}_{\text{ov}}(\text{I}_{\bar{\mathbf{C}}_e}) = \mu(\text{I}_{\bar{\mathbf{C}}_e} - 3)$	(2.199)
Spannungsbeziehung in der Referenzkonfiguration	
$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} = \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{vol}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} + \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}}$	(2.200)
$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{vol}} = JU'(J)\mathbf{C}^{-1}$	(2.201)
$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{eq}}^{\text{iso}} = 2J^{-2/3} \left((w_1 + w_2 \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}})\mathbf{1} - w_2 \bar{\mathbf{C}} - \frac{1}{3}(w_1 \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}} + 2w_2 \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}})\bar{\mathbf{C}}^{-1} \right)$	(2.202)
$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} = 2\mu \frac{(\det \mathbf{C}_v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C})^{1/3}} (\mathbf{C}_v^{-1} - \frac{1}{3}(\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1})\mathbf{C}^{-1})$	(2.203)
Fließregel mit Größen in der Referenzkonfiguration	
$\dot{\mathbf{C}}_v = \frac{4\mu}{\eta} \frac{(\det \mathbf{C}_v)^{1/3}}{(\det \mathbf{C})^{1/3}} (\mathbf{C} - \frac{1}{3}(\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}_v^{-1})\mathbf{C}_v)$	(2.204)
Abkürzungen	
$w_1(\text{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial \bar{w}_{\text{eq}}}{\partial \text{I}_{\bar{\mathbf{C}}}}, \quad w_2(\text{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}) = \frac{\partial \bar{w}_{\text{eq}}}{\partial \text{II}_{\bar{\mathbf{C}}}}$	
$\eta = \eta_0 \exp \left(-s_0 \sqrt{\mathbf{C} \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} \cdot \tilde{\mathbf{T}}_{\text{ov}} \mathbf{C}} \right)$	(2.205)

Analog zu Abschnitt 2.5.3.2 bildet die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}}_e \mathbf{F}_p \quad (2.206)$$

in einen elastischen und inelastischen Anteil, $\hat{\mathbf{F}}_e$ und \mathbf{F}_p , die Ausgangsbasis zur Definition der Kinematik, siehe Abb. 2.6. Unter Voraussetzung plastischer Inkompressibilität,

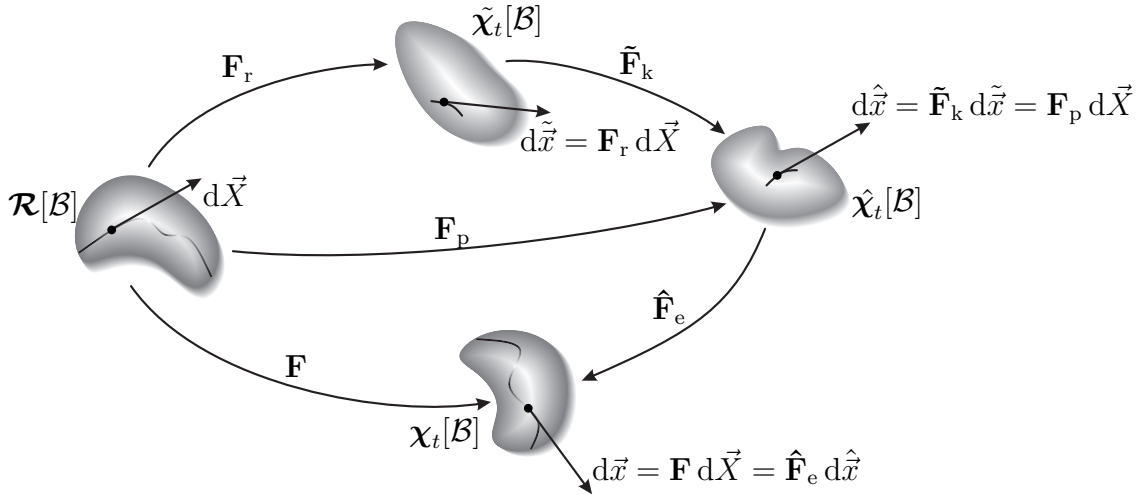


Abbildung 2.6: Zwischenkonfigurationen impliziert durch die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten

$\det \mathbf{F}_p = 1$, wird der plastische Deformationsgradient \mathbf{F}_p ein weiteres Mal multiplikativ in

$$\mathbf{F}_p = \tilde{\mathbf{F}}_k \mathbf{F}_r \quad (2.207)$$

aufgespalten. Hierbei steht $\tilde{\mathbf{F}}_k$ im Zusammenhang mit den Effekten der kinematischen Verfestigung und der infolgedessen im materiellen Körper reversibel gespeicherten Verzerrungsenergie. Die verbleibende plastische Deformation \mathbf{F}_r schlägt eine Verbindung zu den dissipativen Effekten des Materialmodells, siehe auch [Hartmann et al., 2008a]. Wie Quint [2007] konkretisiert, ruft \mathbf{F}_r die Spannungsleistung hervor, welche als Wärme dissipiert wird. Mit Blick auf Abbildung 2.6 und den eingeführten inkompatiblen Zwischenkonfigurationen, $\tilde{\chi}_t$ und $\hat{\chi}_t$, resultieren daraus eine Reihe von Deformations- und Verzerrungstensors sowie Verzerrungsgeschwindigkeiten. Weiterführende Informationen hierzu können [Quint und Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2008a] entnommen werden.

Zur Konkretisierung des Modells wird für die spezifische freie Energie $\bar{\psi}$ ein Ansatz

$$\bar{\psi}(J_e, \bar{\mathbf{C}}_e, \hat{\mathbf{F}}_k) = \bar{\psi}_e(J_e, \bar{\mathbf{C}}_e) + \bar{\psi}_p(\hat{\mathbf{F}}_k), \quad (2.208)$$

mit $J_e = \det \hat{\mathbf{F}}_e = \det \mathbf{F}$, $\hat{\mathbf{C}}_e = \hat{\mathbf{F}}_e^T \hat{\mathbf{F}}_e$, $\bar{\mathbf{C}}_e = (\det \hat{\mathbf{C}}_e)^{-1/3} \hat{\mathbf{C}}_e$ und $\hat{\mathbf{F}}_k = 1/2(1 - \tilde{\mathbf{F}}_k^{-T} \tilde{\mathbf{F}}_k^{-1})$, gewählt. Hierbei zerfällt der elastische Anteil der Verzerrungsenergie $\bar{\psi}_e$ analog zu Abschnitt 2.5.3.1 in

$$\bar{\psi}_e(J_e, \bar{\mathbf{C}}_e) = U(J_e) + \bar{v}(\bar{\mathbf{C}}_e). \quad (2.209)$$

Die Spezifizierung von $U(J_e)$ und $\bar{v}(\bar{\mathbf{C}}_e)$ in Form des schwach-inkompressiblen Neo-Hooke-Typs, siehe Tabellen 2.5 und 2.6, führt auf

$$U(J_e) = \frac{K}{2}(J_e - 1)^2 \quad \text{und} \quad \bar{v}(\bar{\mathbf{C}}_e) = \bar{w}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}_e}) = \frac{G}{2}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}_e} - 3). \quad (2.210)$$

Der Schubmodul G und der Neo-Hooke-Materialparameter c_{10} sind durch die Beziehung $G = 2c_{10}$ verknüpft. Der plastische Anteil der freien Energie $\bar{\psi}_p$ ist definiert als eine quadratische Funktion

$$\bar{\psi}_p(\hat{\mathbf{T}}_k) = \frac{c_1}{2}(\text{tr } \hat{\mathbf{T}}_k)^2 + \frac{c_2}{2}\hat{\mathbf{T}}_k^D \cdot \hat{\mathbf{T}}_k^D \quad (2.211)$$

in Abhängigkeit des auf der Zwischenkonfiguration $\hat{\chi}_t$ operierenden Verzerrungstensors $\hat{\mathbf{T}}_k$.¹⁰⁷

Der Standardargumentation in der Materialtheorie folgend, liefert die Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung für isotherme Deformationsprozesse durch Substitution der Gleichungen (2.208) bis (2.211) in die Dissipationsungleichung (2.120) die Potentialbeziehung (2.214) für den Spannungszustand,¹⁰⁸ welche für beliebige elastische als auch elastisch-viskoplastische Prozesse Gültigkeit besitzt.

Zur Unterscheidung des elastischen und viskoplastischen Bereichs wird eine von Mises-Fließfunktion (2.213)¹⁰⁹ mit konstanter Fließspannung \hat{k}^{110} postuliert. Unter Verwendung einer assoziativen Fließregel (2.215) (Normalenregel) und der von Tsakmakis und Willuweit [2004] vorgeschlagenen Entwicklungsgleichung (2.216) ist hierdurch die thermodynamische Konsistenz des Materialmodells gewährleistet. Gleichung (2.216) entspricht einer Verallgemeinerung des bekannten Armstrong und Frederick [1966] Ansatzes auf finite Deformationen zur Beschreibung der kinematischen Verfestigung. Anstatt einer Spannungsformulierung wird jedoch eine Evolutionsgleichung vom Verzerrungstyp verwendet. Die numerische Behandlung der Fließregeln (2.215) und (2.216) erfolgt mit den in Abschnitt 5.2 vorgestellten Zeitintegrationsverfahren. Bedingt durch die Annahme der plastischen Inkompressibilität unterliegen die erwähnten Entwicklungsgleichungen den Zwangsbedingungen $\det \mathbf{C}_p = 1$ und $\det \mathbf{C}_r = 1$. In [Hartmann et al., 2008a] und der dort zitierten Literatur wird gezeigt, dass derartige Nebenbedingungen infolge der Zeitdiskretisierung verletzt werden. Zur Erhaltung dieser mit dem Materialmodell verknüpften Zwangsbedingungen ist daher der Einsatz von speziellen numerischen Verfahren bzw. modifizierten Verfahren erforderlich, siehe hierzu auch Abschnitt D.4.

Für die Wiedergabe von geschwindigkeitsabhängigen Phänomenen wird ein Viskoplastizitätsmodell vom Perzyna-Typ, siehe hierzu z. B. [Perzyna, 1966; Chaboche und

¹⁰⁷Der angegebene Ansatz geht auf die Arbeit von Armstrong und Frederick [1966] zurück.

¹⁰⁸Die hierzu notwendigen Transformationsschritte und Umformungen unter Anwendung der maßgebenden kinematischen Zusammenhänge aus Abb. 2.6 können [Quint, 2007] entnommen werden.

¹⁰⁹Die Fließfunktion

$$f = \sqrt{\frac{3}{2}(\hat{\mathbf{M}} - \hat{\mathbf{X}})^D \cdot (\hat{\mathbf{M}} - \hat{\mathbf{X}})^D}$$

wird im Mandelschen Spannungsraum in Abhängigkeit des Mandelschen Spannungstensors $\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{C}}_e \hat{\mathbf{T}}$ und des kinematischen Verfestigungstensors $\hat{\mathbf{X}} = (\mathbf{1} - 2\hat{\mathbf{T}}_k)\hat{\mathbf{Z}}$ definiert. Hierbei resultieren die Spannungstensoren $\hat{\mathbf{T}}$ und $\hat{\mathbf{Z}}$ aus den Potentialbeziehungen $\hat{\mathbf{T}} = 2 \, d\bar{\psi}_e / d\hat{\mathbf{C}}_e$ und $\hat{\mathbf{Z}} = d\bar{\psi}_p / d\hat{\mathbf{T}}_k$. Die Transformation der Fließfunktion in die Referenzkonfiguration führt auf die in Gl. (2.213) angegebene Form.

¹¹⁰Isotrope Verfestigungsmechanismen werden in dem Materialmodell nicht berücksichtigt.

Rousselier, 1983; Simo und Hughes, 1998; Hartmann et al., 1997b; Hartmann und Bier, 2008], [Haupt, 2002, Kap. 12] und die dort zitierte Literatur, herangezogen, bei dem der plastische Multiplikator λ_p durch den Ausdruck (2.218) definiert ist.¹¹¹ Abschließend sei erwähnt, dass für den Grenzfall $\eta \rightarrow 0$ das zugrunde liegende ratenunabhängige Elastoplastizitätsmodell resultiert. Das gesamte, auf die Referenzkonfiguration transformierte Konstitutivmodell ist in Tab. 2.9 zusammengefasst.

Tabelle 2.9: Zusammenstellung der konstitutiven Gleichungen in der Referenzkonfiguration für das in [Quint, 2007] entwickelte Materialmodell der finiten Viskoplastizität mit Variablen in der Referenzkonfiguration

	Elastizität	Viskoplastizität
Fließfunktion	$f = \sqrt{\frac{3}{2}} \left((\mathbf{C}_p \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{C} \mathbf{C}_p^{-1} - \mathbf{C}_r \mathbf{Z}) \cdot (\tilde{\mathbf{T}} \mathbf{C} - \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{C}_r \mathbf{Z} \mathbf{C}_p) - \frac{1}{3} (\text{tr}(\tilde{\mathbf{T}} \mathbf{C} - \mathbf{C}_r \mathbf{Z}))^2 \right)^{1/2} - \hat{k} \quad (2.213)$	
Belastungsbedingung	$f < 0$	$f \geq 0$
Elastizitätsbeziehung	$\tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{F}_p^{-1} \hat{\mathbf{T}} \mathbf{F}_p^{-T} = 2 \mathbf{F}_p^{-1} \frac{d\bar{\psi}_e}{d\hat{\mathbf{C}}_e} \mathbf{F}_p^{-T} = K(J-1)J\mathbf{C}^{-1} + GJ^{-2/3} (\mathbf{C}_p^{-1} - \frac{1}{3}(\text{tr}(\mathbf{C} \mathbf{C}_p^{-1}))\mathbf{C}^{-1}) \quad (2.214)$	
Fließregeln	$\dot{\mathbf{C}}_p = \mathbf{0}$	$\dot{\mathbf{C}}_p = \lambda_p \frac{\sqrt{6}}{f+\hat{k}} \left(\mathbf{C}_p \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{C} - \mathbf{C}_r \mathbf{Z} \mathbf{C}_p - \frac{1}{3}(\text{tr}(\tilde{\mathbf{T}} \mathbf{C} - \mathbf{C}_r \mathbf{Z}))\mathbf{C}_p \right) \quad (2.215)$
	$\dot{\mathbf{C}}_r = \mathbf{0}$	$\dot{\mathbf{C}}_r = \lambda_p \sqrt{\frac{8}{3}} \beta \left(\mathbf{C}_r \mathbf{Z} \mathbf{C}_r - \frac{1}{3}(\text{tr}(\mathbf{Z} \mathbf{C}_r))\mathbf{C}_r \right) \quad (2.216)$
Abkürzungen	$\mathbf{Z} = \mathbf{F}_p^{-1} \hat{\mathbf{Z}} \mathbf{F}_p^{-T} = \mathbf{F}_p^{-1} \frac{d\bar{\psi}_p}{d\hat{\mathbf{T}}_k} \mathbf{F}_p^{-T} = \frac{1}{2}(\mathbf{c}_1 - \frac{\mathbf{c}_2}{3}) (3 - \text{tr}(\mathbf{C}_r \mathbf{C}_p^{-1})) \mathbf{C}_p^{-1} + \frac{\mathbf{c}_2}{2} (\mathbf{C}_p^{-1} - \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{C}_r \mathbf{C}_p^{-1}) \quad (2.217)$	
	$\lambda_p = \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{f}{\sigma_0} \right\rangle^m \quad (2.218)$	

2.5.3.4 Lineare Elastizitätstheorie

Die Konstitutivgleichungen der linearen Elastizität eines isotropen materiellen Körpers, welche auch als Hookesches Gesetz bezeichnet werden, können aus der Linearisierung der

¹¹¹Die in Gl. (2.218) enthaltene Symbolik $\langle \cdot \rangle$ kennzeichnet die sogenannten Föppl- bzw. McCauley-Klammern. Sie sind definiert als:

$$\langle x \rangle = \begin{cases} x, & \text{für } x \geq 0 \\ 0, & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (2.212)$$

Hyperelastizitätsbeziehung (2.193) gewonnen werden, siehe [Hartmann, 2003, S. 86–88]. Hierzu muss lediglich der Tangentenoperator (2.196) für $\mathbf{F} = \mathbf{1}$, d. h. $\tilde{\mathcal{C}}|_{\mathbf{F}=\mathbf{1}}$, ausgewertet werden. Der Spannungszustand des linear-elastischen Materialmodells, ausgedrückt durch den Spannungstensor \mathbf{T} ,¹¹² kann dann als Abbildung $\mathbf{T} = \mathcal{E}\mathbf{E}_L$ des sogenannten Elastizitätstensors vierter Stufe $\mathcal{E} = \tilde{\mathcal{C}}|_{\mathbf{F}=\mathbf{1}}$ und des linearisierten Greenschen Verzerrungstensors \mathbf{E}_L , vgl. Abschnitt 2.4, wiedergegeben werden. Zur konkreten Darstellung des Elastizitätstensors¹¹³ \mathcal{E} und der Elastizitätsbeziehung listet Tab. 2.10 diverse gleichrangige

Tabelle 2.10: Diverse Darstellungen des Hookeschen Gesetz, übernommen von Hartmann [2003]

Elastizitätsbeziehung	Elastizitätstensor
$\mathbf{T} = \frac{E}{1+\nu} \left(\mathbf{E}_L + \frac{\nu}{1-2\nu} (\text{tr } \mathbf{E}_L) \mathbf{1} \right)$ (2.219)	$\mathcal{E} = \frac{E}{1+\nu} \mathcal{I} + \frac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$
$\mathbf{T} = 2\mu \mathbf{E}_L + \lambda (\text{tr } \mathbf{E}_L) \mathbf{1}$ (2.220)	$\mathcal{E} = 2\mu \mathcal{I} + \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$
$\mathbf{T} = K (\text{tr } \mathbf{E}_L) \mathbf{1} + 2G \mathbf{E}_L^D$ (2.221)	$\mathcal{E} = K \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2G \left[\mathcal{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right]$

Formulierungen in Abhängigkeit von jeweils zwei unabhängigen Materialparametern auf. Hierbei repräsentieren E den Elastizitätsmodul, ν die Querkontraktionszahl, K den Kompressionsmodul und G den Schubmodul. λ und ν tragen die Bezeichnung Lamé-Konstante.¹¹⁴ In Tab. 2.11 sind die einzelnen Umrechnungen für die unabhängigen Materialparameterpaare angegeben. Die Forderung nach einer positiven Formänderungsenergie

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{E}_L) &= \frac{1}{2} \mathbf{T} \cdot \mathbf{E}_L = \frac{1}{2} K (\text{tr } \mathbf{E}_L)^2 + G \mathbf{E}_L^D \cdot \mathbf{E}_L^D \\ &= \frac{E}{2(1+\nu)} \left(\mathbf{E}_L^D \cdot \mathbf{E}_L^D + \frac{1+\nu}{3(1-2\nu)} (\text{tr } \mathbf{E}_L)^2 \right) \end{aligned} \quad (2.222)$$

für beliebige Deformationsprozesse unter Berücksichtigung von $E > 0$ impliziert

$$-1 < \nu < 1/2.$$

¹¹²Aus der Zusammenlegung von Referenz- und Momentankonfiguration folgt die Äquivalenz sämtlicher dynamischer Größen, siehe Gl. (2.142).

¹¹³Die vierstufigen Tensorsummanden ohne die skalaren Vorfaktoren in der rechten Spalte von Tab. 2.10 repräsentieren den Einheitstensor vierter Stufe $\mathcal{I} = [\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}]^{T_{23}}$ sowie den Spur- und Deviatoroperator $[\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}]$ und $[\mathcal{I} - 1/3 [\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}]]$. Die beiden zuletzt aufgezählten Tensoren vierter Stufe werden durch ihre namensgebenden Transformationseigenschaften bei Anwendung auf einen beliebigen Tensor zweiter Stufe \mathbf{A} , d. h. $[\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}] \mathbf{A} = (\text{tr } \mathbf{A}) \mathbf{1}$ und $[\mathcal{I} - 1/3 [\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}]] \mathbf{A} = \mathbf{A} - 1/3 (\text{tr } \mathbf{A}) \mathbf{1} = \mathbf{A}^D$, charakterisiert.

¹¹⁴Für einen Zusammenhang dieser Konstanten mit den Materialparametern der schwach-inkompressiblen Hyperelastizität wird auf [Hartmann, 2003] referiert.

Tabelle 2.11: Materialparameter der linearen, isotropen Elastizitätstheorie

	E, ν	K, G	μ, λ
E, ν		$E = \frac{9KG}{3K + G}$ $\nu = \frac{3K - 2G}{6K + 2G}$	$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}$ $\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$
K, G	$K = \frac{E}{3(1 - 2\nu)}$ $G = \frac{E}{2(1 + \nu)}$		$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ $G = \mu$
μ, λ	$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$ $\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}$	$\lambda = K - \frac{2}{3}G$ $\mu = G$	

Eine schärfere untere Schranke $\nu > 0$ resultiert aus der experimentellen Beobachtung, dass positive Zugspannungen im einaxialen Zugversuch stets positive Querdehnungen zur Folge haben. Äquivalent mit K und G ausgedrückt, lautet die Ungleichung

$$K \geq \frac{2}{3}G. \quad (2.223)$$

Abschließend sei angemerkt, dass sich die additive Aufspaltung des infinitesimalen Verzerrungstensors $\mathbf{E}_L = \mathbf{E}_L^H + \mathbf{E}_L^D$ in einen Kugel- und Deviatoranteil,¹¹⁵ $\mathbf{E}_L^H = 1/3(\text{tr } \mathbf{E}_L)\mathbf{1}$ und $\mathbf{E}_L^D = \mathbf{E}_L - 1/3(\text{tr } \mathbf{E}_L)\mathbf{1}$, auf den Spannungstensor \mathbf{T} überträgt. Im Gegensatz zur Theorie großer Deformationen existiert im Rahmen der geometrisch linearisierten Modellierung von isotropen Konstitutivmodellen eine direkte Zuordnung von \mathbf{E}_L^H mit dem hydrostatischen Spannungszustand¹¹⁶ $\mathbf{T}^H = 1/3(\text{tr } \mathbf{T})\mathbf{1}$ und von \mathbf{E}_L^D mit dem Spannungsdeviator¹¹⁷ $\mathbf{T}^D = \mathbf{T} - 1/3(\text{tr } \mathbf{T})\mathbf{1}$.

2.5.3.5 Viskoelastizität

In der Literatur existieren eine Vielzahl von verschiedenen Darstellungsmöglichkeiten für die lineare Viskoelastizität.¹¹⁸ Auf eine Vorstellung der Spannungsfunktionale in

¹¹⁵Im Rahmen der Theorie kleiner Deformationen wird die volumetrisch-ischore Zerlegung durch die additive Aufspaltung des Verzerrungstensors \mathbf{E}_L wiedergegeben.

¹¹⁶Für das Hookesche Gesetz gilt $\mathbf{T}^H = K(\text{tr } \mathbf{E}_L)\mathbf{1}$

¹¹⁷Für das Hookesche Gesetz gilt $\mathbf{T}^D = 2G\mathbf{E}_L^D$

¹¹⁸Die klassische Theorie der linearen Viskoelastizität entspricht einer Erweiterung der in Abschnitt 2.5.3.4 wiedergegebenen linearen Elastizitätstheorie um dissipatives Materialverhalten in die

Gestalt von Faltungsintegralen mit Gedächtnis- oder von Theorien mit Differentialgleichungen fraktionaler Ordnung wird verzichtet. Stattdessen seien exemplarisch die Arbeiten von Tschoegl [1989], Hartmann et al. [1997a], Lion [2000a], Middendorf [2002], Gerlach [2003] und Kardelky [2004] sowie [Haupt, 2002, Abschn. 5.5] angeführt. Im Folgenden wird auf einer Darstellung der Materialgleichungen, basierend auf einer eindimensionalen Motivation durch das sogenannte Dreiparameter-Modell der linearen Viskoelastizitätstheorie, festgehalten. Das rheologische Ersatzmodell in Abb. 2.7, welches

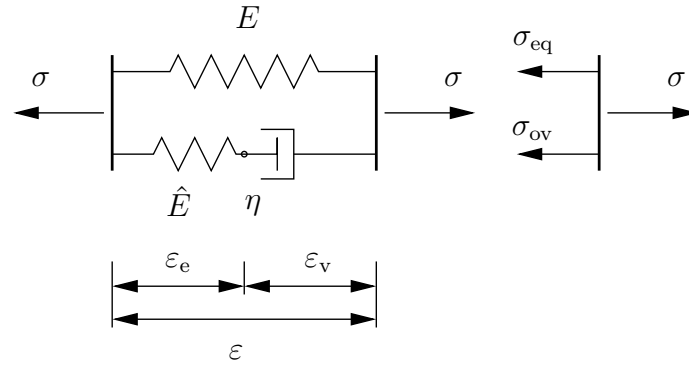


Abbildung 2.7: Dreiparameter-Modell der linearen Viskoelastizitätstheorie

auch die Bezeichnung linear-viskoelastischer Standardfestkörper trägt, besteht aus einer Feder und einem dazu parallel geschalteten Maxwell-Element (Reihenschaltung aus Feder und Dämpfer). Eine Erweiterung des rheologischen Netzwerks durch Parallelschaltung zusätzlicher Maxwell-Elemente wird in der vorliegenden Arbeit nicht verfolgt.¹¹⁹ Der Übergang zu unendlich vielen Summationsgliedern führt auf den Begriff des kontinuierlichen Relaxationsspektrums, siehe [Gross et al., 2014, Abschn. 6.2], welcher häufig in Kombination mit Integralformulierungen des Spannungsfunktionals auftritt. Darüber hinaus sind im Rahmen einer eindimensionalen Materialtheorie der linearen Viskoelastizität sechs skalare Materialfunktionen von Interesse, die zur Charakterisierung des geschwindigkeitsabhängigen Materialverhaltens herangezogen werden. Hierzu zählen die Relaxations- und die Kriechfunktion sowie bei harmonischen Belastungen die dynamischen Moduli (Speicher- und Verlustmodul) und die dynamischen Nachgiebigkeiten (Speicher- und Verlustnachgiebigkeit). Weiterführende Diskussionen zu diesen Themenbereichen sind z. B. in [Lion, 2000a; Gross et al., 2014] zu finden.

Konstitutivmodellierung einzubeziehen, siehe [Haupt, 2002, Abschn. 5.5]. Wie Lion [2000a] darlegt, wurde das geschwindigkeitsabhängige Materialverhalten vieler Polymerwerkstoffe, welches bei dynamischen oder zeitlich veränderlichen Belastungen oberhalb der Glasübergangstemperatur auftritt, in der Vergangenheit vorzugsweise im geometrisch linearen Bereich mit Methoden der klassischen linearen Viskoelastizitätstheorie beschrieben.

Die Begriffsbildung „lineare Viskoelastizität“ bezieht sich im Allgemeinen erst einmal nur auf eine Modellierung von viskoelastischen Materialgleichungen für den geometrisch linearen Bereich. Dies schließt auch die Behandlung von physikalischen Nichtlinearitäten ein, wobei jedoch dann im Rahmen der Modellbildung die Methoden der klassischen linearen Viskoelastizitätstheorie, wie z. B. das Zeit-Temperatur-Verschiebungs-Prinzip, nicht mehr anwendbar sind, siehe z. B. [Sedlan, 2001].

¹¹⁹Auf gleichwertige Darstellungen der rheologischen Modelle durch Reihenschaltungen von Kelvin-Voigt Gruppen wird gänzlich verzichtet.

Die konstitutiven Beziehungen der linear-viskoelastischen Materialklasse, deren Gültigkeitsbereich sich auf die Theorie kleiner Deformationen beschränkt, werden zunächst auf der Basis des einfachen viskoelastischen Standardfestkörpers in Abb. 2.7 motiviert. Die Auswertung der Gleichgewichtsbedingung¹²⁰ für das rheologische Modell impliziert eine additive Zerlegung der einaxialen Spannungskomponente

$$\sigma = \sigma_{\text{eq}} + \sigma_{\text{ov}} \quad (2.224)$$

in eine geschwindigkeitsunabhängige Gleichgewichtsspannung σ_{eq} und einen ratenabhängigen Überspannungsanteil σ_{ov} . Geometrische Betrachtungen des Maxwell-Elements induzieren die Dekomposition

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_v \quad (2.225)$$

in eine elastische ε_e und eine viskose Dehnung ε_v . Basierend auf den vorangegangenen Zerlegungen kann jedem elementaren Baustein aus Abb. 2.7 eine Konstitutivbeziehung

$$\sigma_{\text{eq}} = E\varepsilon, \quad \sigma_{\text{ov}} = \hat{E}\varepsilon_e = \hat{E}(\varepsilon - \varepsilon_v), \quad \sigma_{\text{ov}} = \eta\dot{\varepsilon}_v \quad (2.226)$$

zugeordnet werden. In Verbindung mit den Elastizitätskonstanten E und \hat{E} repräsentieren Gl. (2.226)₁ und Gl. (2.226)₂ das eindimensionale Hookesche Gesetz für die beiden Federn. Der dissipative Dämpfer mit der konstanten Viskosität η wird durch eine geschwindigkeitsproportionale Dämpfung (2.226)₃ charakterisiert. Das Einsetzen der Konstitutivbeziehungen (2.226)₁ und (2.226)₂ in Gl. (2.224) sowie die Substitution der elastischen Verzerrungen ε_e durch Gl. (2.225) führen auf

$$\sigma = \hat{h}(\varepsilon, \varepsilon_v) = E\varepsilon + \hat{E}(\varepsilon - \varepsilon_v). \quad (2.227)$$

Die Entwicklungsgleichung bzw. Fließregel für die viskose Verzerrung

$$\dot{\varepsilon}_v = \hat{r}(\varepsilon, \varepsilon_v) = \frac{\hat{E}}{\eta}(\varepsilon - \varepsilon_v) \quad (2.228)$$

resultiert aus dem Gleichsetzen von Gl. (2.226)₂ und Gl. (2.226)₃. Zusammen definieren der Ausdruck (2.227) und die Evolutionsgleichung (2.228) vom Verzerrungstyp eine von zwei möglichen Darstellungen für ein explizites Algebro-Differentialgleichungssystem (DAE-System) des zugrunde liegenden linear-viskoelastischen Dreiparameter-Modells.¹²¹

¹²⁰Es wird angenommen, dass jedes Element im rheologischen Netzwerk über eine Einheitsfläche als Querschnitt und Einheitslänge verfügt. Erst hierdurch ist es möglich, Gleichgewichts- und Kinematikbetrachtungen anzustellen.

¹²¹Alternativ zu den Evolutionsgleichungen (2.228) vom Verzerrungstyp kann das Spannungsfunktional in impliziter Form auch als ein DAE-System,

$$\begin{aligned} \sigma &= \hat{h}(\varepsilon, \sigma_{\text{ov}}) = E\varepsilon + \sigma_{\text{ov}} \\ \dot{\sigma}_{\text{ov}} &= \hat{r}(\varepsilon, \sigma_{\text{ov}}) = \hat{E}\dot{\varepsilon} - \frac{\hat{E}}{\eta}\sigma_{\text{ov}}, \end{aligned}$$

in Abhängigkeit der Überspannungen σ_{ov} formuliert werden.

Durch Bilden der materiellen Zeitableitung von Gl. (2.227) und Eliminierung der viskosen Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\varepsilon}_v$ mit Hilfe von

$$\dot{\varepsilon}_v = \frac{\sigma_{ov}}{\eta} = \frac{\sigma - \sigma_{eq}}{\eta} = \frac{1}{\eta}(\sigma - E\varepsilon) \quad (2.229)$$

gelingt es, das DAE-System in eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung (ODE) erster Ordnung,

$$\dot{\sigma}(t) + \frac{\hat{E}}{\eta}\sigma(t) = (E + \hat{E})\dot{\varepsilon}(t) + \frac{\hat{E}E}{\eta}\varepsilon(t), \quad (2.230)$$

zu überführen. Die inhomogene ODE (2.230) beschreibt einerseits bei bekannter Verzerung $\varepsilon(t)$ den Spannungszustand¹²² $\sigma(t)$ oder gibt bei bekanntem Spannungsverlauf $\sigma(t)$ die Verzerrungsantwort $\varepsilon(t)$ wieder.¹²³

Ein Nachteil des linear-viskoelastischen Standardfestkörper liegt in der unzureichenden Beschreibung der Geschwindigkeitsabhängigkeit. Zur Veranschaulichung dieses Phänomens wird ein monoton ansteigender Lastpfad in den Dehnungen, $\varepsilon(t) = \bar{K}t$, mit einer konstanten Verzerrungsgeschwindigkeit, $\dot{\varepsilon}(t) = \bar{K}$, vorgegeben. Die Lösung des verzerungsgesteuerten Anfangs-Randwertproblems (2.230) mit der Anfangsbedingung $\sigma(0) = 0$ lautet:

$$\sigma(t) = \eta\bar{K} \left(1 - e^{-\hat{E}/\eta t}\right) + E\bar{K}t \quad (2.231)$$

bzw.

$$\hat{\sigma}(\varepsilon) = \overbrace{\eta\bar{K} \left(1 - e^{-\hat{E}/(\eta\bar{K})\varepsilon}\right)}^{\sigma_{ov}} + \overbrace{E\varepsilon}^{\sigma_{eq}} \quad (2.232)$$

Aus der Spannungsantwort (2.232), siehe Abb. 2.8a, wird ersichtlich, dass nach einem transienten Bereich die ratenabhängigen Überspannungen für $t \rightarrow 0$ gegen den asymptotischen Wert $\lim_{t \rightarrow 0} \sigma_{ov}(t) = \eta\bar{K}$ streben. Hierbei ist die stationäre Antwort in den Überspannungen, also die Abweichung des dynamischen Spannungs-Dehnungsverlaufs von der Gleichgewichtskennlinie, proportional zum Produkt $\eta\bar{K}$. Es ist offensichtlich, dass die lineare Geschwindigkeitsabhängigkeit des Maxwell-Elements ihre Ursache in der konstanten, d. h. prozessunabhängigen, Viskosität η hat. In der Realität zeigen jedoch Werkstoffe keine solche lineare Ratenabhängigkeit. Abhilfe für dieses Problem schafft die in Analogie zu Abschnitt 2.5.3.2 definierte Viskositätsfunktion

$$\eta = \eta_0 e^{-s_0|\sigma_{ov}|} = \eta_0 e^{-s_0|\sigma - E\varepsilon|}, \quad (2.233)$$

welche als Funktion in den Überspannungen formuliert wird. Dem prozessabhängigen Viskositätsansatz (2.233) geschuldet, muss nun ein Anfangs-Randwertproblem mit einer nichtlinearen ODE

$$\dot{\sigma} + \frac{\hat{E}}{\eta(\sigma, \varepsilon)}\sigma = (E + \hat{E})\dot{\varepsilon} + \frac{\hat{E}E}{\eta(\sigma, \varepsilon)}\varepsilon \quad (2.234)$$

¹²²Für einen verzerungsgesteuerten Prozess wird zur Definition eines Anfangs-Randwertproblems der Anfangsspannungszustand $\sigma(t_0) = \sigma_0$ benötigt.

¹²³Für einen spannungsgesteuerten Prozess wird zur Definition eines Anfangs-Randwertproblems der Anfangsverzerrungszustand $\varepsilon(t_0) = \varepsilon_0$ benötigt.

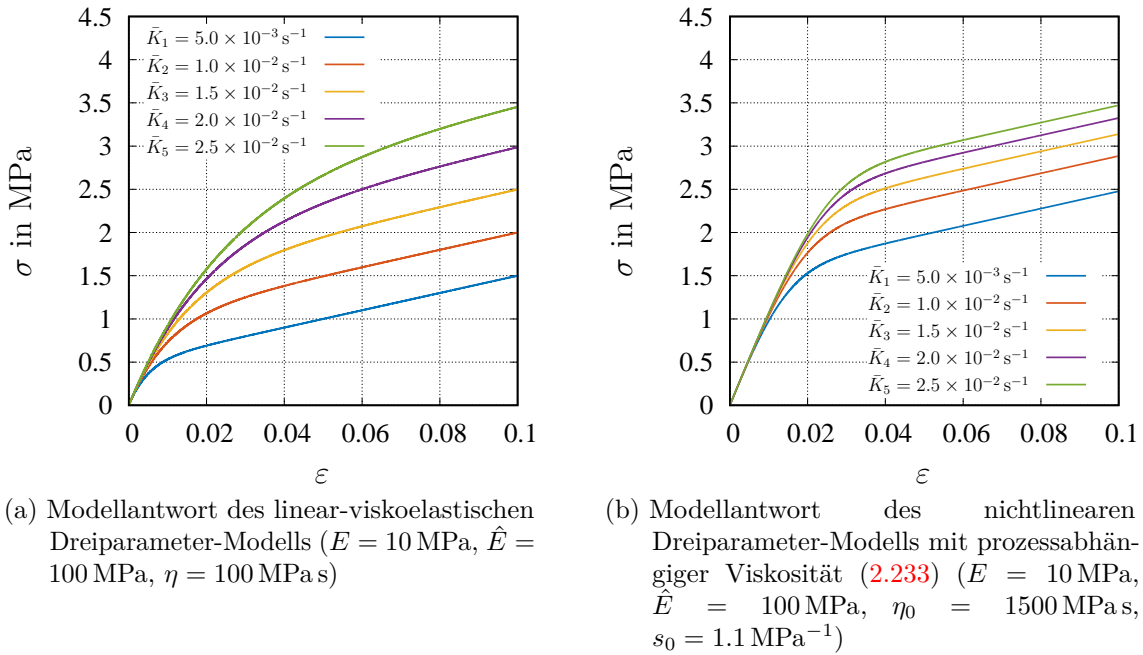


Abbildung 2.8: Eindimensionale Spannungs-Dehnungsverläufe des linear viskoelastischen und nichtlinear-viskoelastischen Dreiparameter-Modells für einen monotonen dehnungskontrollierten Zugversuch mit verschiedenen Verzerrungsraten \bar{K}_i , $i = 1, \dots, 5$

gelöst werden. Die hieraus resultierende nichtlineare ratenabhängige Modellantwort des Dreiparameter-Modells für den monotonen Zugversuch mit verschiedenen Dehnungsgeschwindigkeiten \bar{K}_i , $i = 1, \dots, 5$, ist in Abb. 2.8b dargestellt.

Bei der Übertragung auf dreidimensionale Spannungs- und Verzerrungszustände wird die Grundstruktur des rheologischen Modells beibehalten. Lediglich die Elastizitätsbeziehungen der elastischen Federn werden durch das dreidimensionale Hookesche Gesetz aus Abschnitt 2.5.3.4 ausgetauscht, vgl. Gl.(2.239) und Gl. (2.240). Das vollständige Modell ist in Tab. 2.12 zusammengefasst, siehe auch [Hartmann, 2005].

Aus experimentellen Beobachtungen ergibt sich, dass viele Werkstoffe vernachlässigbare viskose Effekte bei rein volumetrischen Beanspruchungszuständen zeigen. Es wird daher häufig die Annahme getroffen, dass der hydrostatische Spannungszustand aus rein elastischen Deformationen entsteht. Dies induziert an das Konstitutivmodell in Tab. 2.12 die Bedingung $\hat{K} = 0$, sodass sich die Überspannungen \mathbf{T}_{ov} und inneren Variablen $\mathbf{q} = \mathbf{E}_{Lv}$ rein deviatorisch entwickeln.

2.5.3.6 Thermoelastizität

Im folgenden Abschnitt soll die Materialklasse der Thermoelastizität bei kleinen Deformationen diskutiert werden, siehe hierzu [Haupt, 2002, S. 509–530]. Ausgehend von einer additiven Zerlegung des linearisierten Verzerrungstensor

$$\mathbf{E}_L = \mathbf{E}_M + \mathbf{E}_\Theta \quad (2.243)$$

Tabelle 2.12: Zusammenstellung der konstitutiven Beziehungen für ein physikalisch nicht-lineares Materialmodell der isotropen Viskoelastizität bei kleinen Deformationen

Freie Energie	
$\psi(\mathbf{E}_L, \mathbf{E}_{Lv}) = \psi_{\text{eq}}(\mathbf{E}_L) + \psi_{\text{ov}}(\mathbf{E}_{Lv})$	(2.235)
$\psi_{\text{eq}}(\mathbf{E}_L) = \frac{1}{2}K(\text{tr } \mathbf{E}_L)^2 + G\mathbf{E}_L^D \cdot \mathbf{E}_L^D$	(2.236)
$\psi_{\text{ov}}(\mathbf{E}_{Lv}) = \frac{1}{2}\hat{K}(\text{tr}(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_{Lv}))^2 + \hat{G}(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_{Lv})^D \cdot (\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_{Lv})^D$	(2.237)
Spannungsbeziehung	
$\mathbf{T} = \mathbf{T}_{\text{eq}} + \mathbf{T}_{\text{ov}}$	(2.238)
$\mathbf{T}_{\text{eq}} = K(\text{tr } \mathbf{E}_L)\mathbf{1} + 2G\mathbf{E}_L^D$	(2.239)
$\mathbf{T}_{\text{ov}} = \hat{K}(\text{tr}(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_{Lv}))\mathbf{1} + 2\hat{G}(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_{Lv})^D$	(2.240)
Fließregel	
$\dot{\mathbf{E}}_{Lv} = \frac{1}{\eta}\mathbf{T}_{\text{ov}} = \frac{1}{\eta} \left(\hat{K}(\text{tr}(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_{Lv}))\mathbf{1} + 2\hat{G}(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_{Lv})^D \right)$	(2.241)
Abkürzungen	
$\eta = \eta_0 \exp \left(-s_0 \sqrt{\mathbf{T}_{\text{ov}} \cdot \mathbf{T}_{\text{ov}}} \right)$	(2.242)

in einen mechanischen Anteil \mathbf{E}_M und thermischen Anteil $\mathbf{E}_\Theta = \alpha_\Theta \vartheta(\vec{x}, t) \mathbf{1}$ wird die spezifische freie Energie $\hat{\psi}(\mathbf{E}_L, \Theta)$ durch den Ausdruck (2.247) definiert.¹²⁴ Der skalare Vorfaktor der volumetrischen Temperaturdehnung \mathbf{E}_Θ ergibt sich aus dem Produkt des Wärmeausdehnungskoeffizienten α_Θ und der auf eine Referenztemperatur $\Theta_0(\vec{x})$ bezogenen Temperaturdifferenz $\vartheta(\vec{x}, t) = \Theta(\vec{x}, t) - \Theta_0(\vec{x})$. Der aus der mechanischen Deformation hervorgehende Energieanteil $\hat{\psi}_M(\mathbf{E}_M)$ gemäß Gl. (2.248) induziert die isotrope lineare Elastizitätsbeziehung (2.250), vgl. auch Gl. (2.221). Die Materialparameter K und G symbolisieren den in Abschnitt 2.5.3.4 eingeführten Kompressions- und Schubmodul. Für den thermischen Energieanteil $\hat{\psi}_\Theta(\Theta)$ wird der quadratische Ansatz (2.249) mit der Materialkonstante c_Θ gewählt.

Zur Gewährleistung der thermodynamischen Konsistenz für beliebige thermomechanische Prozesse wird die Clausius-Duhem-Ungleichung (2.153) unter Berücksichtigung der Zeitableitung $d\hat{\psi}/dt$ und der Legendre-Transformation

$$\hat{\psi} = e - \Theta s \quad (2.244)$$

ausgewertet. Hieraus ergeben sich die in Tab. 2.13 angegebenen Potentialbeziehungen (2.250) und (2.251) für den Spannungszustand \mathbf{T} und die spezifische Entropie s . Für den verbleibenden letzten Summand $-1/(\rho\Theta) \text{grad } \Theta \cdot \vec{q}$ der Dissipationsungleichung (2.153) wird zur Erfüllung von $1/(\rho\Theta) \text{grad } \Theta \cdot \vec{q} \leq 0$ die Gültigkeit des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes (2.179) aus Abschnitt 2.5.3, mit der temperaturveränderlichen thermischen Konduktivität $\hat{\kappa}(\Theta)$, vorausgesetzt. Im Rahmen der Thermoelastizitätstheorie reduziert sich der erste Hauptsatz (2.152) auf die sogenannte Gibbssche Wärmeleitungsgleichung

$$\Theta \dot{s} = -\frac{1}{\rho} \text{div } \vec{q} + r_\Theta, \quad (2.245)$$

siehe auch [Haupt, 2002]. Die Kombination des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes (2.179) und der Zeitableitung der spezifischen Entropie \dot{s} in Verbindung mit Gl. (2.245) führen auf die analytisch exakte Form der verallgemeinerten Wärmeleitungsgleichung

$$\hat{c}_p(\Theta) \dot{\Theta} = \frac{1}{\rho} \text{div}(\hat{\kappa}(\Theta) \text{grad } \Theta) + r_\Theta + \hat{p}_\Theta(\dot{\mathbf{E}}_L, \Theta), \quad (2.246)$$

mit der temperaturabhängigen spezifischen Wärmekapazität $\hat{c}_p(\Theta)$ und dem thermoelastischen Produktionsterm $\hat{p}_\Theta(\dot{\mathbf{E}}_L, \Theta)$, siehe Gleichungen (2.253) und (2.254). Für den Fall kleiner Temperaturänderungen, d. h. $\Theta \approx \Theta_0$, kann die Materialfunktion $\hat{c}_p(\Theta)$ der spezifischen Wärmekapazität, siehe Gl. (2.253), durch eine Konstante $\bar{c}_p = (c_\Theta - 9K\alpha_\Theta^2/\rho)\Theta_0$ ersetzt werden. Das gesamte Konstitutivmodell ist in Tab. 2.13 zusammengefasst.

2.5.3.7 Thermoviskoplastizität

Nach [Lion, 2000b] beschreibt das in Abb. 2.9 dargestellte eindimensionale rheologische Modell ein thermoviskoplastisches Materialverhalten, welches im Rahmen der geometrisch linearen Theorie in [Erbs et al., 2015; Rothe et al., 2015a] auf dreidimensionale Spannungs-

¹²⁴Die Formänderungsenergien $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}_M$ und $\hat{\psi}_\Theta$ kennzeichnen spezifische Größen pro Masseneinheit.

Tabelle 2.13: Zusammenstellung der konstitutiven Beziehungen für ein Materialmodell der Thermoelastizität

Freie Energie	
$\hat{\psi}(\mathbf{E}_L, \Theta) = \hat{\psi}_M(\mathbf{E}_M(\mathbf{E}_L, \Theta)) + \hat{\psi}_\Theta(\Theta)$	(2.247)
$\hat{\psi}_M(\mathbf{E}_M) = \frac{1}{\varrho} \left(\frac{K}{2} (\text{tr } \mathbf{E}_M)^2 + G \mathbf{E}_M^D \cdot \mathbf{E}_M^D \right)$	(2.248)
$\hat{\psi}_\Theta(\Theta) = -\frac{c_\Theta}{2} \vartheta^2 = -\frac{c_\Theta}{2} (\Theta - \Theta_0)^2$	(2.249)
Spannungsbeziehung	
$\mathbf{T} = \varrho \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{E}_L, \Theta)}{\partial \mathbf{E}_L} = \varrho \frac{d\hat{\psi}_M(\mathbf{E}_M)}{d\mathbf{E}_M} = K(\text{tr } \mathbf{E}_M) \mathbf{1} + 2G \mathbf{E}_M^D$ $= K(\text{tr } \mathbf{E}_L - 3\alpha_\Theta \vartheta) \mathbf{1} + 2G \mathbf{E}_L^D$	(2.250)
Entropie	
$s = -\frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{E}_L, \Theta)}{\partial \Theta} = -\hat{\psi}'_\Theta(\Theta) + \frac{\alpha_\Theta}{\varrho} (\text{tr } \mathbf{T})$ $= \left(c_\Theta - \frac{9K\alpha_\Theta^2}{\varrho} \right) \vartheta + \frac{3K\alpha_\Theta}{\varrho} (\text{tr } \mathbf{E}_L)$	(2.251)
Wärmeleitungsgleichung	
$\hat{c}_p(\Theta) \dot{\Theta} = \frac{1}{\varrho} \text{div}(\hat{\kappa}(\Theta) \text{grad } \Theta) + r_\Theta + \hat{p}_\Theta(\dot{\mathbf{E}}_L, \Theta),$	(2.252)
Abkürzungen	
$\hat{c}_p(\Theta) = -\Theta \frac{\partial^2 \hat{\psi}(\mathbf{E}_L, \Theta)}{\partial \Theta^2} = \left(c_\Theta - \frac{9K\alpha_\Theta^2}{\varrho} \right) \Theta$	(2.253)
$\hat{p}_\Theta(\dot{\mathbf{E}}_L, \Theta) = \Theta \frac{\partial^2 \hat{\psi}(\mathbf{E}_L, \Theta)}{\partial \Theta \partial \mathbf{E}_L} \cdot \dot{\mathbf{E}}_L = -\frac{3K\alpha_\Theta \Theta}{\varrho} (\text{tr } \dot{\mathbf{E}}_L)$	(2.254)
$\vartheta(\vec{x}, t) = \Theta(\vec{x}, t) - \Theta_0(\vec{x})$	(2.255)

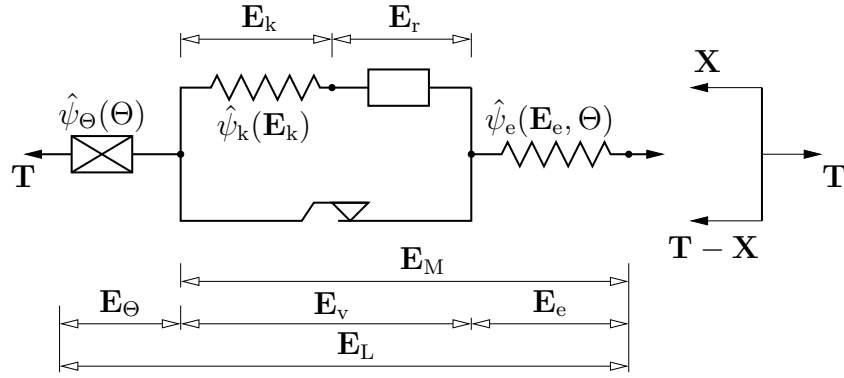


Abbildung 2.9: Rheologisches Modell der Thermoviskoplastizität, übernommen von Erbts et al. [2015] und Rothe et al. [2015a]

und Verzerrungszustände erweitert wird. In Analogie zu Abschnitt 2.5.3.6 wird eine Aufspaltung des linearisierten Verzerrungstensors \mathbf{E}_L gemäß Gl. (2.243) postuliert. Hieran anknüpfend übertragen sich die multiplikativen Zerlegungen (2.206) und (2.207) für das finite Viskoplastizitätsmodell aus Abschnitt 2.5.3.3 auf die kinematisch linearen Dekompositionen

$$\mathbf{E}_M = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_v \quad \text{und} \quad \mathbf{E}_v = \mathbf{E}_k + \mathbf{E}_r. \quad (2.256)$$

Gl. (2.256)₁ kennzeichnet eine Aufspaltung in einen elastischen \mathbf{E}_e und einen inelastischen Anteil \mathbf{E}_v . Die aus den viskosen Verzerrungen \mathbf{E}_v resultierende Spannungsleistung wird nicht vollständig in Wärme umgewandelt, sodass eine Zerlegung (2.256)₂ in energetisch reversible \mathbf{E}_k und irreversible \mathbf{E}_r Verzerrungen erfolgt. Die in dem Temperaturelement und in den zwei Federn aus Abb. 2.9 gespeicherten Formänderungsenergien motivieren die folgende Zerlegung der spezifischen freien Energie

$$\hat{\psi}(\mathbf{E}_e, \mathbf{E}_k, \Theta) = \hat{\psi}_e(\mathbf{E}_e, \Theta) + \hat{\psi}_k(\mathbf{E}_k) + \hat{\psi}_\Theta(\Theta), \quad (2.257)$$

mit den konkreten Verzerrungsenergiefunktionen

$$\hat{\psi}_e(\mathbf{E}_e, \Theta) = \frac{1}{\varrho} \left(\frac{K(\Theta)}{2} (\text{tr } \mathbf{E}_e)^2 + G(\Theta) \mathbf{E}_e^D \cdot \mathbf{E}_e^D \right), \quad (2.258)$$

$$\hat{\psi}_k(\mathbf{E}_k) = \frac{1}{\varrho} \left(\frac{c_X}{2} \mathbf{E}_k^D \cdot \mathbf{E}_k^D \right), \quad (2.259)$$

$$\hat{\psi}_\Theta(\Theta) = -\frac{c_\Theta}{2} (\Theta - \Theta_0)^2. \quad (2.260)$$

In Analogie zu Abschnitt 2.5.3.6 wird zur Gewährleistung der thermodynamischen Konsistenz die Clausius-Duhem-Ungleichung (2.153) ausgewertet. Unter Berücksichtigung der temperaturabhängigen Materialfunktionen $K(\Theta)$ und $G(\Theta)$ für den Kompressions- und Schubmodul ergeben sich die Potentialbeziehungen (2.262) und (2.266), welche für beliebige elastische als auch elastisch-viskoplastische Prozesse Gültigkeit besitzen.

Zur Unterscheidung des elastischen und viskoplastischen Bereichs wird eine von Mises-Fließfunktion (2.261) mit temperaturveränderlicher isotroper Verfestigungsfunktion (2.268)

gewählt. Die assoziative Fließregel (2.263) und die Entwicklungsgleichung vom Verzerungstyp (2.264), die den kinematischen Verfestigungsmechanismus¹²⁵ beschreibt, sind notwendige Voraussetzungen zur Erhaltung der thermodynamischen Konsistenz. In Übereinstimmung mit Abschnitt 2.5.3.3 ermöglicht die Regularisierungsfunktion (2.267) für den plastischen Multiplikator λ_p in Abhängigkeit der Viskosität η die Wiedergabe von geschwindigkeitsabhängigen Phänomenen, siehe hierzu [Perzyna, 1966; Chaboche und Rousselier, 1983; Simo und Hughes, 1998; Hartmann et al., 1997b; Hartmann und Bier, 2008]. Tab. 2.14 fasst die mechanischen Konstitutivgleichungen in Abhängigkeit der

Tabelle 2.14: Zusammenstellung der konstitutiven Gleichungen für ein von [Erbs et al., 2015; Rothe et al., 2015a] porträtiertes Materialmodell der Thermoviskoplastizität

	Elastizität	Viskoplastizität
Fließfunktion	$f(\mathbf{T}, \mathbf{X}, \Theta) = \sqrt{\frac{3}{2}}(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D \cdot (\mathbf{T} - \mathbf{X})^D - \hat{k}(\Theta)$ (2.261)	
Belastungsbedingung	$f < 0$	$f \geq 0$
Elastizitätsbeziehung	$\mathbf{T} = \rho \frac{d\hat{\psi}_e(\mathbf{E}_e)}{d\mathbf{E}_e}$ $= K(\Theta)(\text{tr } \mathbf{E}_L)\mathbf{1} + 2G(\Theta)(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_v)^D - 3K(\Theta)\alpha_\Theta \vartheta \mathbf{1}$ (2.262)	
Fließregeln	$\dot{\mathbf{E}}_p = \mathbf{0}$	$\dot{\mathbf{E}}_p = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{T}} / \left\ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{T}} \right\ _F = \lambda_p \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D}{\ (\mathbf{T} - \mathbf{X})^D\ _F}$ (2.263)
	$\dot{\mathbf{E}}_r = \mathbf{0}$	$\dot{\mathbf{E}}_r = \lambda_p \beta \mathbf{X}^D$ (2.264)
Abk.	$K(\Theta) = K_0 - c_K \vartheta, \quad G(\Theta) = G_0 - c_G \vartheta, \quad \vartheta = \Theta - \Theta_0$ (2.265)	
	$\mathbf{X} = \rho \frac{d\hat{\psi}_k(\mathbf{E}_k)}{d\mathbf{E}_k} = c_X \mathbf{E}_k^D = c_X(\mathbf{E}_v - \mathbf{E}_r)^D$ (2.266)	
	$\lambda_p = \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{f(\mathbf{T}, \mathbf{X}, \Theta)}{\sigma_0} \right\rangle^m$ (2.267)	
	$\hat{k}(\Theta) = (k_0 - k_H)e^{-b\vartheta} + k_H$ (2.268)	

linearisierten Verzerrung \mathbf{E}_L , der Temperatur Θ und den inneren Variablen \mathbf{E}_v und \mathbf{E}_r noch einmal zusammen.

Die Auswertung des ersten Hauptsatzes (2.152) unter Berücksichtigung des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes (2.179) mit einer temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit $\hat{\kappa}(\Theta)$ und der Legendre-Transformation (2.244), wobei zur Erfüllung der Clausius-Duhem-

¹²⁵Der Ansatz (2.264) ist identisch mit dem nichtlinearen kinematischen Verfestigungsmodell von Armstrong und Frederick [1966]. Weiterführende Erklärungen sind z. B. in [Hartmann, 1993; Hartmann et al., 1997b; Simo und Hughes, 1998; Tsakmakis und Willuweit, 2004] zu finden.

Ungleichung der Ausdruck für die spezifische Entropie s aus der Potentialbeziehung

$$\begin{aligned} s &= -\frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{E}_e, \mathbf{E}_k, \Theta)}{\partial \Theta} + \frac{\alpha_\Theta}{\varrho} (\text{tr } \mathbf{T}) \\ &= c_\Theta \vartheta + \frac{3K(\Theta)\alpha_\Theta}{\varrho} \gamma(\mathbf{E}_L, \Theta) + \frac{c_K}{2\varrho} \gamma^2(\mathbf{E}_L, \Theta) + \frac{c_G}{\varrho} (\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_v)^D \cdot (\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_v)^D \end{aligned} \quad (2.269)$$

resultiert, führen auf die verallgemeinerte Wärmeleitungsgleichung

$$\hat{c}_p(\text{tr } \mathbf{E}_L, \Theta) \dot{\Theta} = -\frac{1}{\varrho} \text{div } \vec{q} + r_\Theta + \hat{p}_\Theta(\mathbf{E}_L, \dot{\mathbf{E}}_L, \Theta, \mathbf{E}_v, \dot{\mathbf{E}}_p, \mathbf{E}_r). \quad (2.270)$$

Identisch zu Abschnitt 2.5.3.6 kennzeichnet $\hat{c}_p(\text{tr } \mathbf{E}_L, \Theta)$ die spezifische Wärmekapazitätsfunktion¹²⁶

$$\hat{c}_p(\text{tr } \mathbf{E}_L, \Theta) = \left(c_\Theta - \frac{9K(\Theta)\alpha_\Theta^2}{\varrho} - \frac{3c_K\alpha_\Theta}{\varrho} \gamma(\text{tr } \mathbf{E}_L, \Theta) \right) \Theta, \quad (2.271)$$

mit der Abkürzung $\gamma(\text{tr } \mathbf{E}_L, \Theta) = \text{tr } \mathbf{E}_L - 3\alpha_\Theta \vartheta$. Die Wärmeproduktion

$$p_\Theta = \hat{p}_\Theta(\mathbf{E}_L, \dot{\mathbf{E}}_L, \Theta, \mathbf{E}_v, \dot{\mathbf{E}}_p, \mathbf{E}_r),$$

welche sich aus einem thermoelastischen Kopplungs- und Dissipationsterm zusammensetzt, ist definiert als

$$\begin{aligned} \hat{p}_\Theta(\mathbf{E}_L, \dot{\mathbf{E}}_L, \Theta, \mathbf{E}_v, \dot{\mathbf{E}}_p, \mathbf{E}_r) &= \delta - \frac{\Theta}{\varrho} \left((3K(\Theta)\alpha_\Theta + c_K \gamma(\text{tr } \mathbf{E}_L, \Theta)) \mathbf{1} \right. \\ &\quad \left. + 2c_G(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_v)^D \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}_L + \frac{\Theta}{\varrho} 2c_G(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_v)^D \cdot \dot{\mathbf{E}}_p, \end{aligned} \quad (2.272)$$

mit dem dissipativen Summanden

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{1}{\varrho\eta} \left\langle \frac{f(\mathbf{T}, \mathbf{X}, \Theta)}{\sigma_0} \right\rangle^m \left(\|2G(\Theta)(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_v)^D - c_X(\mathbf{E}_v - \mathbf{E}_r)^D\|_F \right. \\ &\quad \left. - \beta c_X^2 \|(\mathbf{E}_v - \mathbf{E}_r)^D\|_F^2 \right). \end{aligned} \quad (2.273)$$

Eine detaillierte Darstellung des Konstitutivmodells ist in [Erbts et al., 2015; Rothe et al., 2015a] zu finden.

¹²⁶Die Materialfunktion $\hat{c}_p(\text{tr } \mathbf{E}_L, \Theta)$ wird sowohl temperatur- als auch deformationsabhängig modelliert.

3 Kontaktmechanik

Das folgende Kapitel soll im Rahmen einer geometrisch exakten Theorie eine kurze Einführung in die wesentlichen Begriffe und Konzepte der Kontaktmechanik geben. Aus einem kontinuumsmechanischen Blickwinkel heraus, liegt der Schwerpunkt mit Beschränkung auf den dreidimensionalen Fall auf der Erklärung der Kontaktkinematik und auf typischen Formulierungen von Kontaktbedingungen ohne das Annahmen einer spezifischen Diskretisierungsstrategie, siehe hierzu Abschnitt 5.5, einfließen. Für ein tiefgreifendes Studium zu den genannten Themen sei der interessierte Leser auf die Textbücher von Kikuchi und Oden [1988] und Willner [2003], den Beitrag von Wriggers und Zavarise [2004] oder auf die neueren Monographien von Laursen [2003] und Wriggers [2006] über computergestützte Berechnungsmethoden im Bereich der Numerischen Kontaktmechanik verwiesen. Thermomechanische Effekte sollen entgegen den Darstellungen aus Kapitel 2 bei der Behandlung der unilateralen Kontaktproblematik außer Acht gelassen werden.

3.1 Problembeschreibung und Kontaktkinematik

Klassische Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen, siehe Kapitel 4, entsprechen idealisierten Lastannahmen, da die materiellen Gebietsgrenzen, auf denen sie wirken, bekannt sind. Aus der Perspektive von dynamisch ablaufenden Kontaktvorgängen zwischen materiellen Körpern ist dies jedoch nicht mehr ausreichend. Die Erweiterung der Kontinuumstheorie zur Erfassung potentieller Kontaktinteraktionen zwischen verschiedenen materiellen Körpern erfordert die Betrachtung von nichtlinearen, kontinuierlich sich ändernden Kontaktrandbedingungen bei denen die Ausdehnung der Kontaktzonen auf den Rändern, die Kontaktkräfte und die zugehörigen Bewegungen der Kontaktgebiete a priori unbekannt sind. Sie müssen aus diesem Grund als Teil des zu lösenden Anfangs-Randwertproblems ermittelt werden. Neben den bisher eingeführten geometrischen und physikalischen Nichtlinearitäten entspricht der sich verändernde Satz von Kontaktrandbedingungen damit einer weiteren Nichtlinearitätsressource (Nichtlinearitätsursache).¹

Zur Ableitung einer allgemeinen Problembeschreibung existieren prinzipiell zwei Klassen von unilateralen Kontaktproblemen.² Die erste Kategorie, das sogenannte Signorini-

¹In erster Linie kann eine Kontaktinteraktion mathematisch als nichtlinearer Satz von Randbedingungen interpretiert werden.

²In der Mechanik bezeichnet der Terminus unilateraler Kontakt oder einseitiger Kontakt mechanische Nebenbedingungen, die eine Durchdringung zweier materieller Körper, wobei der jeweilige Kontaktkörper starr oder deformierbar modelliert werden kann, verhindern. Weiterhin hängt die Definition des unilateralen Kontakts nicht von der Präsenz von Interfaceffekten, wie z. B. Reibung, ab. Für gewöhnlich werden unilaterale Kontaktinteraktionen mit Hilfe einer Abstandsfunktion und dem im Kontakt-Interface auftretenden Beanspruchungen beschrieben, siehe hierzu die nachfolgenden Ausführungen. Bei den in der vorliegenden Arbeit behandelten Problemstellungen mit Kontakt handelt es sich ausschließlich um

Kontakt- oder Einkörper-Kontaktproblem, beschreibt die Kontaktinteraktion zwischen einem deformierbaren materiellen Körper und einem Starrkörper.³ Die jedoch in der vorliegenden Arbeit aufgegriffene Kontaktproblematik, siehe Abb. 3.1, beschränkt sich auf

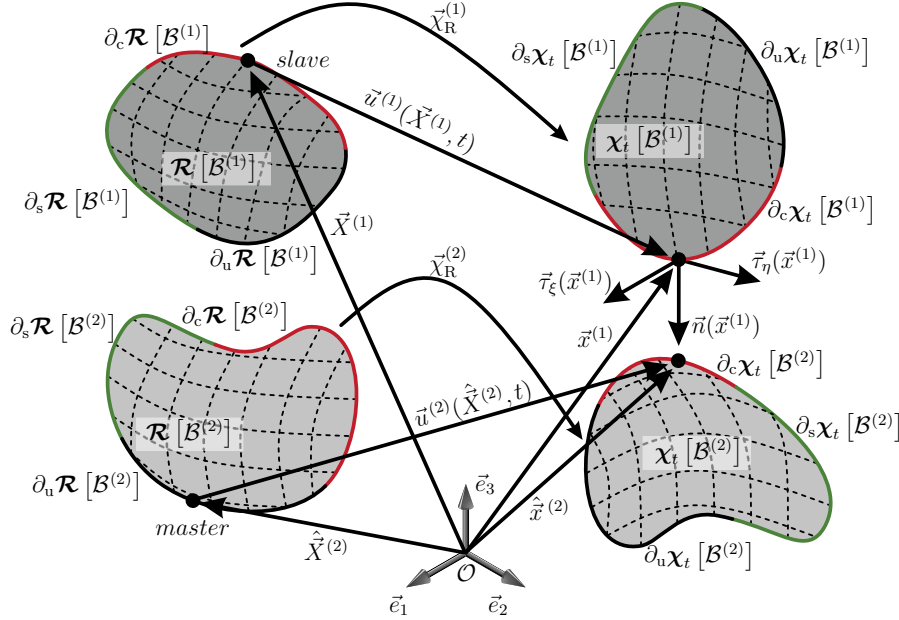


Abbildung 3.1: Geometrisch nichtlineare Kontaktkinematik für ein unilaterales Kontaktproblem zwischen zwei deformierbaren Körpern

die Interaktion zwischen zwei deformierbaren materiellen Körpern $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$, welche finite Deformationsprozesse erfahren.⁴ Der in Klammern hochgestellte Index $i = 1, 2$ soll zur Unterscheidung der beiden Körper bzw. zur Differenzierung der den Körpern zugeordneten physikalischen Größen dienen. In Anlehnung an Kapitel 2 kennzeichnen $\mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}]$ und $\chi_t[\mathcal{B}^{(i)}]$ die von dem jeweiligen materiellen Körper $\mathcal{B}^{(i)}$ eingenommene Referenz- und Momentankonfiguration, welche durch die Bewegung

$$\vec{\chi}_R^{(i)} : \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] \times \mathbb{I} \rightarrow \chi_t[\mathcal{B}^{(i)}], (\vec{X}^{(i)}, t) \mapsto \vec{x}^{(i)} = \vec{\chi}_R^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t), \quad i = 1, 2, \quad (3.1)$$

ineinander überführt werden. Der mechanische Gebietsrand jedes Körpers in der Referenzkonfiguration $\mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}]$ wird in drei nicht überlappende Teilränder $\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}]$, $\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}]$ und $\partial_c \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}]$ zerlegt, sodass

$$\begin{aligned} \partial \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] &= \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] \cup \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] \cup \partial_c \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}], \\ \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] \cap \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] &= \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] \cap \partial_c \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] = \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] \cap \partial_c \mathcal{R}[\mathcal{B}^{(i)}] = \emptyset \end{aligned} \quad (3.2)$$

unilaterale Kontaktprobleme.

³Aufgrund der analytischen Oberflächenbeschreibung des starren Hindernisses ermöglicht die Problembeschreibung nach Signorini [1933] signifikante Vereinfachungen in der Algorithmik, siehe hierzu exemplarisch [Campos et al., 1982; Kikuchi und Oden, 1988; Petrov et al., 1994; Hartmann, 2007], [Laursen, 2003, S. 70–75] sowie [Wriggers, 2006, S. 109–112].

⁴Die Beschreibung von Selbstkontakt und von Kontaktinteraktionen zwischen $i > 2$ verschiedenen Körpern werden in der vorliegenden Arbeit nicht betrachtet.

gilt.⁵ Neben Randgebieten mit vorgegebenen Verschiebungen und Oberflächenspannungen,⁶ $\partial_u \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$ und $\partial_s \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$, repräsentiert $\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$ einen weiteren Bereich auf dem Rand, auf dem die Kontaktrandbedingungen definiert werden. Der Teilrand $\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$ wird so gewählt, dass dort alle potentiellen Kontakttereignisse innerhalb des betrachteten Zeitintervalls $\mathbb{I} =]t_0, t_e[$ zwischen den Zeitpunkten t_0 und t_e ablaufen. Die dabei tatsächlich involvierte Kontaktzone, das sogenannte aktive Kontaktgebiet $\partial_a \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}] \subset \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$, ist a priori unbekannt und zeitlich veränderlich. Die augenblickliche Berührungszone muss als Teil der nichtlinearen Lösungsalgorithmik bestimmt werden. Das Komplement zu $\partial_a \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$ entspricht der inaktiven Kontaktzone $\partial_i \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}] = \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}] \setminus \partial_a \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$. Die räumlichen Pendanten tragen die Bezeichnung $\partial_u \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}]$, $\partial_s \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}]$, $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}]$, $\partial_a \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}]$, $\partial_i \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}]$ und sind ebenfalls an die Restriktionen

$$\begin{aligned} \partial \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] &= \partial_u \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] \cup \partial_s \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] \cup \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}], \\ \partial_u \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] \cap \partial_s \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] &= \partial_u \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] \cap \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] = \partial_s \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] \cap \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(i)}] = \emptyset \end{aligned} \quad (3.3)$$

gebunden.

Eine fundamentale geometrische Größe zur Detektierung des Kontaktzustands zweier materieller Körper ist die Abstandsfunktion⁷

$$\begin{aligned} g(\vec{X}^{(1)}, t) &= -\vec{n} \cdot \vec{g}(\vec{X}^{(1)}, t) = -\vec{n} \cdot (\vec{x}^{(1)} - \hat{\vec{x}}^{(2)}) \\ &= -\vec{n} \cdot (\vec{\chi}_R^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \vec{\chi}_R^{(2)}(\hat{\vec{X}}^{(2)}, t)) \\ &= -\vec{n} \cdot (\vec{\chi}_R^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \vec{\chi}_R^{(2)}(\vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t), t)), \end{aligned} \quad (3.4)$$

welche durch das Skalarprodukt zwischen dem nach außen gerichteten Normaleneinheitsvektor der Momentankonfiguration \vec{n} und dem relativen Positionsvektor

$$\vec{g}(\vec{X}^{(1)}, t) = \vec{x}^{(1)} - \hat{\vec{x}}^{(2)} = \vec{\chi}_R^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \vec{\chi}_R^{(2)}(\vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t), t) \quad (3.5)$$

in der Momentankonfiguration definiert ist. Zur Unterscheidung der Kontaktflächen in der Referenz- und Momentankonfiguration der beiden materiellen Körper und unter Einhaltung einer klassischen Nomenklatur wird in der vorliegenden Arbeit $\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(1)}]$ bzw. $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ als Slave-Fläche und $\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}]$ bzw. $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(2)}]$ als Master-Fläche bezeichnet.⁸ In den weiteren Ausführungen tritt die Annahme in den Vordergrund,

⁵Zur Vereinfachung der Notation werden Kombinationen aus Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen sowie den zu spezifizierenden Kontaktrandbedingungen an identischen Positionen in unterschiedlichen Raumrichtungen in der vorliegenden Arbeit nicht adressiert, siehe hierfür z. B. [Hartmann, 2003]. Die in Kapitel 5 vorgestellten Diskretisierungsstrategien im Raum schließen jedoch rein formal derartige komplexere Mixturen von Randbedingungen nicht aus.

⁶Für weitere Details zur Gebietszerlegung der Berandung wird auf Abschnitt 4 verwiesen.

⁷Alternativ wird die Abstandsfunktion g auch als Normalklaffung oder in verkürzter Form als Klaffung bezeichnet. In der englischsprachigen Literatur wird der Begriff „gap function“ verwendet.

⁸Im Rahmen der in diesem Abschnitt angestellten kontinuumsmechanischen Betrachtungen zur Kontaktmechanik dient das Slave-Master Konzept lediglich als Differenzierungsmerkmal. Eine Vertauschung der beiden Seiten ist problemlos möglich. Sobald eine Raumdiskretisierung der Kontaktformulierung stattfindet, siehe Abschnitt 5.5, hat die Wahl von Slave- und Master-Seite Einfluss auf die Ergebnisse der Berechnungen.

dass alle relevanten kontaktbeschreibenden Größen und die in den Abschnitten 3.2 und 3.3 einzuführenden Kontaktbedingungen in Abhängigkeit von $\vec{X}^{(1)} \in \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(1)}]$ parametrisiert werden können.⁹ Diese slave-seitige Nachverfolgung gelingt, indem für jeden materiellen Punkt in der Referenzkonfiguration $\vec{X}^{(1)} \in \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(1)}]$ zu dessen räumlichen Pendant $\vec{x}^{(1)} = \vec{\chi}_R^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t)$, $\vec{x}^{(1)} \in \partial_c \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ die Existenz eines zugehörigen Kontakt- bzw. Projektionspunktes

$$\hat{\vec{x}}^{(2)} = \vec{\chi}_R^{(2)}(\hat{\vec{X}}^{(2)}, t) = \vec{\chi}_R^{(2)}(\vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t), t) \in \partial_c \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(2)}], \quad (3.6)$$

auf der Master-Seite postuliert wird.¹⁰ Für die Identifikation von $\hat{\vec{X}}^{(2)} \in \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}]$ ist die klassische orthogonale Projektion (CPP)¹¹

$$\hat{\vec{X}}^{(2)} = \arg \min_{\vec{X}^{(2)} \in \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}]} \|\vec{\chi}_R^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \vec{\chi}_R^{(2)}(\vec{X}^{(2)}, t)\| \quad (3.7)$$

ein verbreiteter Ansatz, siehe z. B. [Wriggers, 2006, S. 59] bzw. [Laursen, 2003, S. 113–116]. Damit ermöglicht die Vorschrift (3.7) die Spezifikation der formal eingeführten Abbildung

$$\vec{\chi}_{\Gamma_c}: \begin{cases} \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(1)}] \times \mathbb{I} & \rightarrow \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}] \\ (\vec{X}^{(1)}, t) & \mapsto \hat{\vec{X}}^{(2)} = \vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t). \end{cases} \quad (3.8)$$

Entgegen Abbildung 3.1 wird zur Formulierung des minimalen Distanzproblems (3.7) vorzugsweise eine traditionelle Beschreibung der Kontaktkinematik verwendet, siehe hierzu [Laursen und Simo, 1993a; Chawla und Laursen, 1998; Laursen, 2003; Wriggers, 2006; Hartmann, 2007]. Diese Darstellung basiert auf einer Parametrisierung der Master-Fläche $\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}]$ bzw. $\partial_c \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(2)}]$ durch konvektive Koordinaten $\xi^{(2)} = \{\xi^{(2)}, \eta^{(2)}\}^T$ und der Konstruktion eines Normalenvektors sowie einer tangentialen Basis zur Charakterisierung von Schlupf¹² in dem materiellen Punkt $\hat{\vec{X}}^{(2)} \in \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}]$ bzw. $\hat{\vec{x}}^{(2)} \in \partial_c \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(2)}]$. Einen umfassenden Überblick zur CPP und an das Verfahren gestellte Anforderungen, wie z. B. die Konvexität der Kontaktregion, sowie mögliche Widersprüche aufgrund von Nicht-eindeutigkeit des Minimierungsproblems können [Konyukhov und Schweizerhof, 2008] entnommen werden. In einer analogen Vorgehensweise gelingt es eine Parametrisierung

⁹In Anlehnung an Laursen [2003], Hartmann [2007], Popp [2012] und Gitterle [2012] wird die zu parametrisierende Kontaktseite als Slave-Oberfläche bezeichnet.

¹⁰Zur Bestimmung der masterseitigen Kontaktpunkte werden die Positionsvektoren auf der Slave-Seite in Bezug auf die Bewegung der Master-Oberfläche überwacht. Im Folgenden werden die Orts- und Geschwindigkeitsvektoren der Projektionspunkte durch einen Platzhalter in der Form $(\hat{\cdot})$ gekennzeichnet.

¹¹In der englischsprachigen Literatur wird die orthogonale Projektionsmethodik als „closest point projection“ oder hiervon abgeleitet als CPP betitelt.

¹²Die Basis der kovarianten Tangentenvektoren wird in der englischsprachigen Literatur als „slip advected base“ bezeichnet, da sie dem mitwandernden Projektionspunkt $\hat{\vec{X}}^{(2)} = \vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t)$ von $\vec{X}^{(1)}$ folgt. Bezogen auf die Master-Oberfläche setzen sich die bewegenden Basissysteme aus den Tangentenvektoren (nicht orthonormierte Tangentenvektoren) $\vec{T}_{\xi}^{(2)}$ und $\vec{T}_{\eta}^{(2)}$ auf $\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}]$ sowie aus $\vec{\tau}_{\xi}^{(2)}$ und $\vec{\tau}_{\eta}^{(2)}$ auf $\partial_c \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(2)}]$ zusammen.

der kontaktbeschreibenden Größen in Abhängigkeit von $\vec{x}^{(1)} \in \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ herbeizuführen, welche jedoch diesmal auf die Projektionsabbildung

$$\vec{\chi}_{\gamma_c} : \begin{cases} \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}] \times \mathbb{I} & \rightarrow \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(2)}] \\ (\vec{x}^{(1)}, t) & \mapsto \hat{\vec{x}}^{(2)} = \vec{\chi}_{\gamma_c}(\vec{x}^{(1)}, t) \end{cases} \quad (3.9)$$

zurückgreift. Eine Möglichkeit der Definition des Operators $\vec{\chi}_{\gamma_c}$ ist die CPP in der Gestalt

$$\hat{\vec{x}}^{(2)} = \arg \min_{\vec{x}^{(2)} \in \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(2)}]} \|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}\|. \quad (3.10)$$

Basierend auf der Arbeit von Popp [2012] liegt der Fokus der vorliegenden Abhandlung auf der Anwendung eines leicht abgeänderten Identifikationsansatzes für $\hat{\vec{X}}^{(2)}$ und $\hat{\vec{x}}^{(2)}$, der glatte Projektionsabbildungen $\vec{\chi}_{\Gamma_c}$ und $\vec{\chi}_{\gamma_c}$ für die Kontaktschnittstelle impliziert. Die exakte numerische Umsetzung im Rahmen einer Mortar-Kontaktformulierung wird in Abschnitt 5.5 nachgereicht. Ein wesentlicher Bestandteil des Algorithmus ist jedoch die Definition des normierten Normalenvektors \vec{n} gemäß Abb. 3.1 auf der aktuellen Slave-Seite $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ in $\vec{x}^{(1)}$. Zusammen mit den zwei Einheitsvektoren $\vec{\tau}_\xi$ und $\vec{\tau}_\eta$, welche eine im Punkt $\vec{x}^{(1)}$ errichtete Tangentialebene definieren, sollen \vec{n} , $\vec{\tau}_\xi$ und $\vec{\tau}_\eta$ eine Orthogonalbasis formen. Die algorithmische Konstruktion dieser in $\vec{x}^{(1)}$ angehefteten Basis wird detailliert in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 veranschaulicht. Die Kontaktfläche $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ definiert im dreidimensionalen Raum eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit, sodass jede Größe auf $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ in Abhängigkeit von zwei lokalen Koordinaten parametrisiert werden kann. Im Hinblick auf eine mortar-basierte Finite-Elemente-Diskretisierung, siehe Abschnitt 5.5, ist es vorteilhaft ein konvektives Koordinatensystem $\xi^{(1)} = \{\xi^{(1)}, \eta^{(1)}\}^T$, $\xi^{(1)} \in \mathcal{A}_\xi^{(1)}$, auf der Slave-Oberfläche einzuführen, siehe hierzu [Wriggers und Mieke, 1992; Wriggers und Mieke, 1994; Laursen und Simo, 1993a; Laursen, 2003; Wriggers, 2006]. Mit den Abbildungen

$$\vec{\Psi}_R^{(1)} : \begin{cases} \mathcal{A}_\xi^{(1)} \rightarrow \partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(1)}] \\ \xi^{(1)} \mapsto \vec{X}^{(1)} = \vec{\Psi}_R^{(1)}(\xi^{(1)}) \end{cases} \quad \text{und} \quad t \mapsto \vec{\Psi}_t^{(1)} : \begin{cases} \mathcal{A}_\xi^{(1)} \rightarrow \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}] \\ \xi^{(1)} \mapsto \vec{x}^{(1)} = \vec{\Psi}_t^{(1)}(\xi^{(1)}) \end{cases} \quad (3.11)$$

lassen sich die Kontaktflächen $\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(1)}]$ und $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ in Abhängigkeit eines kontravarianten Koordinatenpaares $\xi^{(1)}$ aus dem Parameterraum $\mathcal{A}_\xi^{(1)}$ ausdrücken, siehe Abb. 3.2 für zusätzliche schematische Erläuterungen. Zudem gelingt es eine Berechnungsvorschrift für die beiden kovarianten Tangentenvektoren¹³

$$\vec{\tau}_\xi^{(1)} = \vec{\Psi}_{t, \xi^{(1)}}^{(1)} = \frac{\partial \vec{\Psi}_t^{(1)}}{\partial \xi^{(1)}}, \quad \vec{\tau}_\eta^{(1)} = \vec{\Psi}_{t, \eta^{(1)}}^{(1)} = \frac{\partial \vec{\Psi}_t^{(1)}}{\partial \eta^{(1)}} \quad (3.12)$$

und den Normaleneinheitsvektor

$$\vec{n} = \frac{\vec{\tau}_\xi^{(1)} \times \vec{\tau}_\eta^{(1)}}{\|\vec{\tau}_\xi^{(1)} \times \vec{\tau}_\eta^{(1)}\|} \quad (3.13)$$

¹³Die kovarianten Basisvektoren (Tangentialvektoren) $\vec{\tau}_\xi^{(1)}$ und $\vec{\tau}_\eta^{(1)}$ bilden im Allgemeinen keine orthogonale Tangentialbasis. Sie dürfen daher nicht mit der orthogonalen Tangentialbasis, bestehend aus den Vektoren $\vec{\tau}_\xi$ und $\vec{\tau}_\eta$, gleichgesetzt werden.

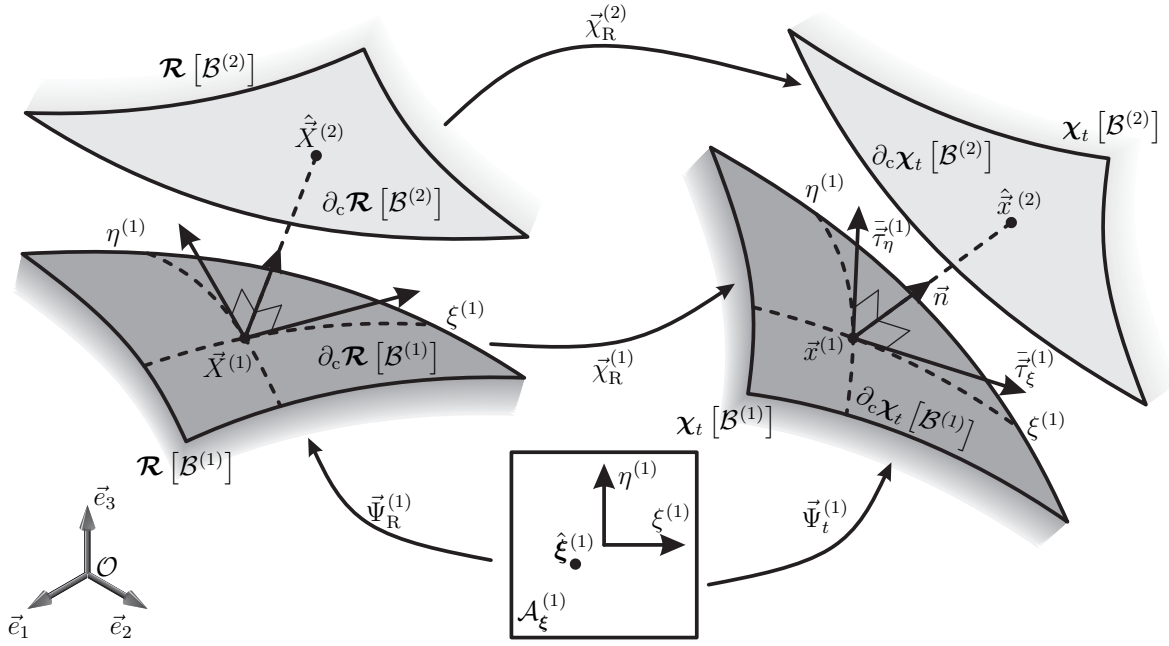


Abbildung 3.2: Minimales Distanzproblem und Einführung eines slave-seitigen, konvektiven Koordinatensystems zur Konstruktion der Tangenten- und Normalenvektoren in der Referenz- und Momentankonfiguration

in der Momentankonfiguration anzugeben. Unter Berücksichtigung von Gl. (3.11)₁ gelten identische Aussagen auch für die im Punkt $\vec{X}^{(1)}$ angeheftete kovariante Basis in der Referenzkonfiguration:¹⁴

$$\vec{T}_\xi^{(1)} = \vec{\Psi}_{R,\xi^{(1)}}^{(1)} = \frac{\partial \vec{\Psi}_R^{(1)}}{\partial \xi^{(1)}}, \quad \vec{T}_\eta^{(1)} = \vec{\Psi}_{R,\eta^{(1)}}^{(1)} = \frac{\partial \vec{\Psi}_R^{(1)}}{\partial \eta^{(1)}}, \quad \vec{n}_R = \frac{\vec{T}_\xi^{(1)} \times \vec{T}_\eta^{(1)}}{\|\vec{T}_\xi^{(1)} \times \vec{T}_\eta^{(1)}\|} \quad (3.14)$$

Während die Abstandsfunktion (3.4) die Kontaktinteraktion in der normalen Richtung wiedergibt, charakterisiert der Relativgeschwindigkeitsvektor

$$\begin{aligned} \check{v}_\tau(\vec{X}^{(1)}, t) &= \vec{v}^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \hat{v}^{(2)}(\hat{X}^{(2)}, t) \\ &= \vec{v}^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \hat{v}^{(2)}(\vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t), t), \end{aligned} \quad (3.15)$$

ausgedrückt als Differenz der materiellen Geschwindigkeiten an den Positionen $\vec{X}^{(1)}$ und $\hat{X}^{(2)}$, die ratenabhängige Kinematik in tangentialer Richtung. Es ist zu beachten, dass $\hat{v}^{(2)}$ die materielle Zeitableitung des auf der Master-Oberfläche mitwandernden Projektionspunktes¹⁵ kennzeichnet, d. h.

$$\hat{v}^{(2)} = \left. \frac{d}{dt} \vec{\chi}_R^{(2)}(\hat{X}^{(2)}, t) \right|_{\hat{X}^{(2)} = \text{const.}}. \quad (3.16)$$

¹⁴Die Darstellung von Kontaktproblemen basierend auf einer reinen kovarianten Oberflächenbeschreibung einschließlich aller in Bezug auf die konvektiven Koordinaten durchgeführten Linearisierungen ist z. B. in [Schweizerhof und Konyukhov, 2005; Konyukhov und Schweizerhof, 2006; Konyukhov und Schweizerhof, 2008; Konyukhov und Izi, 2015] zu finden.

¹⁵Hartmann [2007] gibt eine anschauliche Vorstellung des Projektionspunktes $\hat{X}^{(2)} = \vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t)$,

Des Weiteren sei angemerkt, dass der Ausdruck (3.15) lediglich für perfektes Gleiten und dauerhaften Kontakt, d. h.

$$g = 0 \quad \text{und} \quad \dot{g} = 0 \quad (3.17)$$

bzw.

$$\vec{g} = \vec{0} \quad \text{und} \quad \dot{\vec{g}} = \frac{d}{dt} \left(\vec{\chi}_R^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \vec{\chi}_R^{(2)}(\hat{\vec{X}}^{(2)}, t) \right) = \vec{0}, \quad (3.18)$$

wobei Gl. (3.18) aus einer kontinuumsmechanischen Betrachtungsweise heraus gleichwertig¹⁶ zur Aussage (3.17) ist, die Interpretation einer Relativgeschwindigkeit bzw. Schlupfrate in Tangentialrichtung liefert, siehe [Laursen, 2003, S. 116–119].¹⁷ Liegt eine Verletzung der aufgezählten Voraussetzungen¹⁸ vor, verliert der Relativgeschwindigkeitsvektor (3.15) seine präzise Interpretation und die Eigenschaft der Beobachter-Indifferenz.¹⁹ In Anlehnung an Gitterle [2012] und Popp [2012] wird zur Entfernung einer potentiellen Normalkomponente in Gl. (3.15) $\check{\vec{v}}_\tau$ in die slave-seitige Tangentialebene projiziert. Es folgt der tangentielle Relativgeschwindigkeitsvektor

$$\begin{aligned} \check{\vec{v}}_\tau(\vec{X}^{(1)}, t) &= (\mathbf{1} - \vec{n} \otimes \vec{n}) \check{\vec{v}}_\tau \\ &= (\mathbf{1} - \vec{n} \otimes \vec{n}) \left(\vec{v}^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \hat{\vec{v}}^{(2)}(\hat{\vec{X}}^{(2)}, t) \right) \\ &= (\mathbf{1} - \vec{n} \otimes \vec{n}) \left(\vec{v}^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t) - \hat{\vec{v}}^{(2)}(\vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t), t) \right), \end{aligned} \quad (3.19)$$

der sich mit Hilfe der slave-seitigen, orthogonalen Tangentenvektoren $\vec{\tau}_\eta$ und $\vec{\tau}_\eta$ in

$$\vec{v}_\tau = v_\tau^\xi \vec{\tau}_\xi + v_\tau^\eta \vec{\tau}_\eta. \quad (3.20)$$

siehe auch Gl. (3.8). In der genannten Arbeit wird der Projektionspunkt $\hat{\vec{X}}^{(2)}$ als der Schatten von dem sich bewegendem materiellen Punkt $\vec{X}^{(1)}$ interpretiert.

¹⁶Im Rahmen einer mortar-basierten Finite-Elemente-Methode können die Annahmen (3.17) und (3.18) nicht alle aufrechterhalten oder nur näherungsweise erfüllt werden, siehe hierzu exemplarisch [Puso und Laursen, 2004b; Gitterle, 2012].

¹⁷Während dem Vorgang des perfekten Gleitens sind und bleiben die zwei Punkte $\vec{x}^{(1)} = \vec{\chi}_R^{(1)}(\vec{X}^{(1)}, t)$ und $\hat{\vec{x}}^{(2)} = \vec{\chi}_R^{(2)}(\vec{\chi}_{\Gamma_c}(\vec{X}^{(1)}, t), t)$ im Raum koinzident. Der Ausdruck (3.15) ist dann identisch mit der Komponentendarstellung $\check{\vec{v}}_\tau = \dot{\xi}^{(2)} \vec{\tau}_\xi^{(2)} + \dot{\eta}^{(2)} \vec{\tau}_\eta^{(2)}$, sodass die materiellen Zeitableitungen der kontravarianten Koordinaten $\xi^{(2)}$ und $\eta^{(2)}$ als Projektion von $\check{\vec{v}}_\tau(\vec{X}^{(1)}, t)$ in die Tangentialebene im Punkt $\hat{\vec{x}}^{(2)}$ interpretiert werden können. Die Tangentialebene wird analog zu Abb. 3.2 und den Gl. (3.11) und (3.12) durch die kovarianten Tangentenvektoren $\vec{\tau}_\xi^{(2)} = \vec{\Psi}_{t, \xi^{(2)}}^{(2)}$ und $\vec{\tau}_\eta^{(2)} = \vec{\Psi}_{t, \eta^{(2)}}^{(2)}$ auf der Master-Seite konstruiert (traditionelle Beschreibung der Kontaktkinematik). Durch eine entsprechende Rückwärts-Transformation ist auch eine konvektive Darstellung der Relativgeschwindigkeit möglich. Für weitere Details sei auf [Laursen, 2003] verwiesen.

¹⁸Im Kontext einer Penalty-Regularisierungsstrategie oder für den Fall von sich nicht im Kontakt befindenden materiellen Punkten kann Gl. (3.17)₁ nicht erfüllt werden. Auch die Oberflächendiskretisierung von extrem gekrümmten Oberflächen mit Hilfe der Mortar-Methode führt zur Nichteinhaltung von Gl. (3.18)₁, siehe [Puso und Laursen, 2004b].

¹⁹Laursen [2003] zeigt, dass die Differenz der materiellen Geschwindigkeiten (3.15) lediglich für den Fall des perfekten Gleitens objektiv ist. Mit Blick auf eine mortar-basierte Finite-Elemente-Methode, siehe Abschnitt 5.5, können jedoch die Annahmen (3.17) und (3.18) nicht vollständig gewährleistet werden, sodass algorithmische Anpassungen für $\check{\vec{v}}_\tau$ zur Erfüllung der Eigenschaft der Beobachter-Indifferenz erforderlich sind, siehe hierzu Abschnitt 5.5.1. Für Erläuterungen zu räumlichen, objektiven Größen sei auf Abschnitt 2.5.1 verwiesen.

zerlegen lässt. Im Folgenden soll \vec{v}_τ als Schlupfrate zur Formulierung von Reibmodellen Anwendung finden.

Auf dem Weg zu einer vollständigen Problembeschreibung ist neben den kinematischen Größen g und \vec{v}_τ auch die Kenntnis über die Kinetik auf dem Kontaktrand unerlässlich. Für den slave-seitigen Spannungsvektor in der Kontaktfuge $\vec{t}_c^{(1)}$ wird eine Aufteilung in einen normalen $p_N \vec{n}$ und tangentialen Anteil \vec{t}_τ gewählt. Die Komponentendarstellung von $\vec{t}_c^{(1)}$ ist definiert als

$$\vec{t}_c^{(1)} = p_N \vec{n} + \vec{t}_\tau = p_N \vec{n} + t_\tau^\xi \vec{\tau}_\xi + t_\tau^\eta \vec{\tau}_\eta. \quad (3.21)$$

Aus der lokalen Impulsbilanz in der gemeinsamen Kontaktschnittstelle zweier kontaktierender materieller Körper folgt die Äquivalenz von

$$\vec{t}_c^{(1)}(\vec{x}^{(1)}, t) da^{(1)} = -\vec{t}_c^{(2)}(\hat{\vec{x}}^{(2)}, t) da^{(2)}, \quad (3.22)$$

sodass zur Charakterisierung der Oberflächenspannungen in der Kontaktfuge nur die Bestimmung von $\vec{t}_c^{(1)}$ erforderlich ist. Das differentielle Kräftegleichgewicht (3.22) setzt voraus, dass alle materiellen Punkte $\vec{x}^{(1)} \in \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ durch eine geeignete Transformationsvorschrift, siehe Gl. (3.9), in Punkte $\hat{\vec{x}}^{(2)} \in \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(2)}]$ auf der Master-Oberfläche abgebildet werden können.

3.2 Normalkontakt

Die lokalen Normalkontaktrandbedingungen können in Form der klassischen Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen (KKT-Bedingungen), welche häufig in der Literatur auch als Hertz-Signorini-Moreau Bedingungen für reibungslosen Kontakt Erwähnung finden, zusammengefasst werden. Sie lauten

$$g(\vec{X}^{(1)}, t) \geq 0, \quad p_N(\vec{X}^{(1)}, t) \leq 0, \quad p_N(\vec{X}^{(1)}, t)g(\vec{X}^{(1)}, t) = 0. \quad (3.23)$$

Die erste Ungleichung (3.23)₁ repräsentiert die geometrische Nichtdurchdringungsbedingung (Inpenetrabilitätsbedingung). Entsprechend der eingeführten Vorzeichenkonvention²⁰ für die Klaffung (3.4), siehe auch Abb. 3.3, symbolisieren positive Werte $g > 0$ materielle Punkte, welche sich nicht im Kontakt befinden. Ist der Funktionswert der Abstandsfunktion negativ, $g < 0$, liegt eine physikalisch nicht zulässige Durchdringung der beiden materiellen Körper vor. Im Kontaktfall nimmt die Abstandsfunktion den Wert $g = 0$ an. Die zweite KKT-Ungleichung impliziert die Annahme, dass im Fall der Berührung nur Druckspannungen in der Kontaktfuge übertragen werden. Adhäsionsphänomene, die zum Transfer von Zugspannungen, d. h. $p_N > 0$, in der Kontaktschnittstelle führen, bleiben außer Acht gelassen. Die Komplementaritätsgleichung (3.23)₃ bzw. der sogenannte komplementäre Schlupf (3.23)₃ fordern, dass nur im Kontaktfall eine Übertragung der Druckspannungen stattfindet. Umgekehrt darf keine Normalkomponente p_N transferiert werden, wenn die materiellen Körper getrennt sind. Abb. 3.4a veranschaulicht das nicht-

²⁰Die Definition der Normalenrichtung (3.13) sowie der Abstandsfunktion (3.4) ist in der Literatur zur Kontaktmechanik nicht einheitlich. Als Konsequenz hieraus ergeben sich z. B. diverse Unterschiede in den Vorzeichen bei der Formulierung der KKT-Bedingungen (3.23).

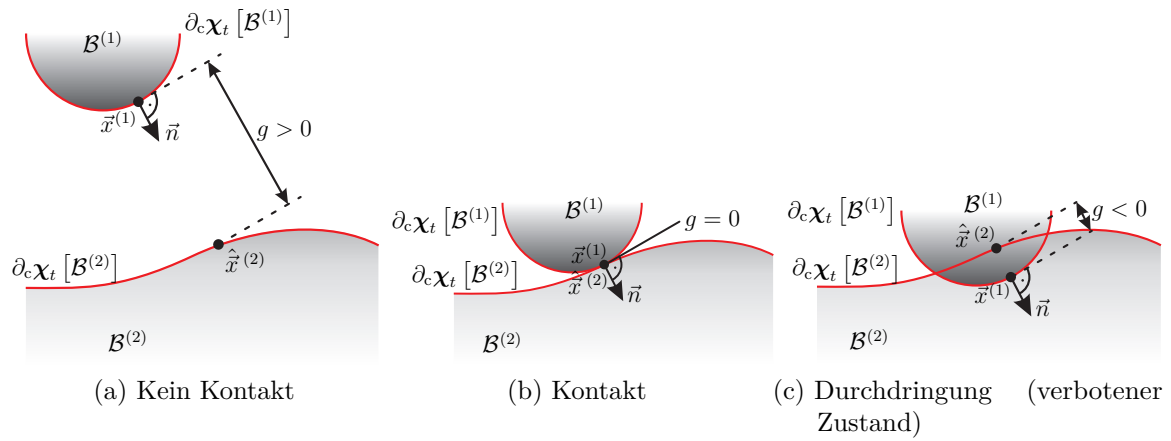
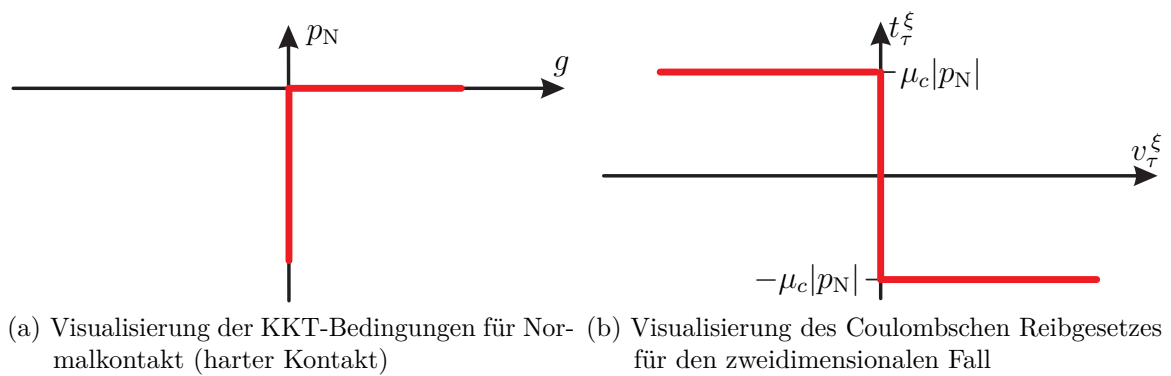

 Abbildung 3.3: Definition der Distanzfunktion g


Abbildung 3.4: Veranschaulichung der Kontaktbedingungen in normaler und tangentialer Richtung

lineare Normalkontaktgesetz, also die Kombination der KKT-Bedingungen (3.23) als funktionelle Beziehung zwischen der Normalspannungskomponente p_N und der Klaffung g . Bei dem rein nach geometrischen Gesichtspunkten gewählten Ansatz wird deutlich, dass ein unstetiger und für $g = 0$ ein nicht differenzierbarer, mehrdeutiger Funktionsverlauf vorliegt.²¹ Die Behandlung der unregularisierten KKT-Bedingungen (3.23) erfordern den Einsatz entsprechender Lösungsalgorithmen aus dem Bereich der Optimierungstheorie, siehe hierzu auch Abschnitt 4.5. Abschließend sei erwähnt, dass das mengenwertige Normalkontaktgesetz (3.23) auch durch spezielle Regularisierungsstrategien einer vereinfachten numerischen Behandlung zugänglich gemacht werden kann. Mitunter kann solch eine Regularisierung sogar durch eine zugrunde liegende mikromechanische Oberflächenstruktur der Körper oder mittels Konstitutivgleichungen des Interface, welche die Oberflächenrauheit und die Härte der kontaktierenden Körper berücksichtigen, motiviert werden. Für eine umfassende Darstellung dieser Thematik sei auf [Wriggers, 2006, S. 69–108] verwiesen.

3.3 Tangentialkontakt

Zusätzlich zu dem in Abschnitt 3.2 eingeführten Normalkontaktgesetz (Normalkontaktmodell), siehe Gl. (3.23), müssen Nebenbedingungen in Tangentialrichtung formuliert werden. Im Rahmen dieser Arbeit liegt der Fokus auf dem reibungslosen Fall, welcher trivialerweise durch die Forderung

$$\vec{t}_\tau = \vec{0} \quad (3.24)$$

abgedeckt ist, sowie dem häufig anzutreffenden Coulombschen Reibgesetz. Das tangentielle Reibmodell nach Coulomb, das auf makroskopischen Beobachtungen zur Modellierung von trockener Reibung aufbaut, ist in einer räumlichen Darstellung gegeben durch

$$\vec{f}_\tau = \|\vec{t}_\tau\| - \mu_c |p_N|, \quad \vec{v}_\tau + \gamma_\tau \frac{\vec{t}_\tau}{\|\vec{t}_\tau\|} = \vec{0}, \quad \gamma_\tau \geq 0, \quad f_\tau \leq 0, \quad \gamma_\tau f_\tau = 0. \quad (3.25)$$

Die direkte Analogie des Coulombschen Reibmodells zu einem starr, ideal plastischen Materialverhalten, vgl. Abb. 3.4b, ist unverkennbar, siehe auch [Simo und Hughes, 1998, S. 9–13]. Die Definition (3.25)₁ der Gleitfunktion \vec{f}_τ bildet dabei das direkte Gegenstück zur Fließfunktion der Plastizitätstheorie. Diese Ähnlichkeit ist speziell während der Entwicklung von numerischen Algorithmen zur Behandlung von Reibung interessant, da sie Anlass zur Wiederverwendung bekannter Konzepte der rechnergestützten Inelastizität gibt.

Das unregularisierte Oberflächen-Konstitutivmodell in Ratenform, ausgedrückt durch die Gleitregel (3.25)₂²² und die KKT-Bedingungen (3.25)₃ bis (3.25)₅, beschreiben die physikalischen Zustände von Haften (Stick) und Gleiten (Slip). Der Lösungszweig des

²¹Aufgrund der Unterscheidung zwischen geöffnetem Kontakt ($g > 0$, $p_N = 0$) und geschlossenem Kontakt ($g = 0$, $p_N < 0$) beschreibt Gl. (3.23) ein mengenwertiges Normalkontaktgesetz. In der englischsprachigen Literatur werden solche Kontaktmodelle auch als „set-valued model“ bezeichnet.

²²Das direkte Analogon der Gleitregel in der Plastizitätstheorie ist die Fließregel mit dem „plastischen“ Multiplikator γ_τ .

Haftens folgt aus Ungleichung (3.25)₄ für $f_\tau < 0$ sowie der Erfüllung der Kontinuitätsbedingung (3.25)₅, sodass keine relative tangential Bewegung in der Kontaktzone stattfindet, d. h. $\gamma_\tau = 0$ und $\vec{v}_\tau = \vec{0}$. Der Wert des übertragenen Tangentialspannungsvektors \vec{t}_τ ist daraufhin mehrdeutig und wird durch $\|\vec{t}_\tau\| < \mu_c |p_N|$ beschränkt. Die Euklidische Vektornorm $\|\vec{t}_\tau\|$ erreicht also nicht den Grenzwert $\mu_c |p_N|$, welcher sich aus dem Produkt von Reibkoeffizient μ_c und Absolutbetrag des Kontaktdrucks $|p_N|$ ergibt. Der Fall des Gleitens, bei dem die beiden Kontaktpartner anfangen aufeinander abzurutschen, tritt für $f_\tau = 0$ bzw. äquivalent hierzu gemäß Definition (3.25)₁ für $\|\vec{t}_\tau\| = \mu_c |p_N|$ ein. Das Verschwinden der Gleitfunktion bzw. das Erreichen der Haftungsgrenze ist ein direktes Resultat aus der Einhaltung der Komplementaritätsgleichung (3.25)₅. Unter Beachtung von $\gamma_\tau > 0$, siehe Gl. (3.25)₃, folgt dann die inkrementelle Beschreibung der Gleitbewegung unmittelbar aus der Gleitregel (3.25)₂, die als Evolutionsgleichung für die relative Geschwindigkeit \vec{v}_τ interpretiert werden kann. Der zweidimensionale Fall des Coulombschen Reibgesetzes ist in Abb. 3.4b schematisch visualisiert.²³ Analog zu Abschnitt 3.2 ist der unstetige, mehrdeutige und nicht differenzierbare Charakter des Funktionsverlaufs hervorzuheben, der im Fall einer Lagrange-Multiplikator-Formulierung den Einsatz einer aufwendigen Aktiven-Mengen-Strategie („active set strategy“), siehe Abschnitt 5.5.5, bedingt. Entsprechende Regularisierungskonzepte, z. B. in Gestalt eines Penalty-Ansatzes²⁴ oder eines Augmented-Lagrange-Ansatzes, können ebenfalls hier Abhilfe schaffen.²⁵ Für weitergehende Informationen hierzu sei auf [Laursen, 2003; Wriggers, 2006] und die dort zitierte Literatur verwiesen. Im Verlauf der Arbeit wird für das pfadabhängige Reibmodell (3.25) nach Coulomb durchgehend ein konstanter Reibkoeffizient μ_c , der lediglich die zugrunde liegende Materialpaarung in der Kontaktzone reflektiert, verwendet. Auf das Reibverhalten Einfluss nehmende Faktoren, wie z. B. der Kontaktdruck, die relative Tangentialgeschwindigkeit, die Oberflächenrauigkeiten oder die Temperaturentwicklung in der Kontaktschnittstelle, bleiben unberücksichtigt. Für einen umfassenden Überblick anderer Oberflächen-Konstitutivmodelle zur Beschreibung von Gleitreibungsvorgängen, die mitunter in der Lage sind, lokale mikromechanische Phänomene in der Kontaktschnittstelle abzubilden, sei auf [Wriggers, 2006, S. 76–98] referiert.

Neben Reibung existieren eine Vielzahl anderer physikalischer Effekte, die innerhalb technischer Systeme in den Berührungszonen sich kontaktierender Bauteile in Erscheinung treten. Die wissenschaftliche Disziplin der Tribologie geht der Beschreibung und Modellierung derartiger Interfacephänomene nach und deckt dabei u. a. Themengebiete wie Schmierung, Verschleiß, Adhäsion sowie thermischen und elektrischen Kontakt ab. Für einen Überblick zu diesem breiten Themenkomplex der Interfacephysik ist es empfehlenswert die Arbeiten von Wriggers [2006, S. 98–108], Popp [2012, S. 26–27], Persson [2000] und Popov [2009] und die dort zitierte Literatur zu konsultieren. Die numerische

²³Im zweidimensionalen Raum definieren die Kontaktflächen nur noch eine eindimensionale Mannigfaltigkeit. Dies hat zur Folge, dass auch für die Komponentendarstellungen (3.20) und (3.21) entsprechende Anpassungen vorzunehmen sind. Es gilt: $\vec{v}_\tau = v_\tau^\xi \vec{\tau}_\xi$, $\vec{t}_c^{(1)} = p_N \vec{n} + \vec{t}_\tau = p_N \vec{n} + t_\tau^\xi \vec{\tau}_\xi$

²⁴Die Formulierung des Coulombschen Reibgesetzes durch einen Penalty-Ansatz ist konform zur Elastoplastizitätstheorie.

²⁵Einige Autoren, wie z. B. [Konyukhov und Izi, 2015], motivieren eine zugrunde liegende Regularisierungsstrategie auf Basis von experimentellen Beobachtungen in der Kontaktschnittstelle.

Umsetzung solcher Interfacemodelle im Rahmen der Methode der finiten Elemente wird z. B. in [Strömberg et al., 1996; Agelet de Saracibar und Chiumenti, 1999; Laursen, 2003; Yang und Laursen, 2009; Stupkiewicz, 2009; Gitterle, 2012] behandelt.

Die in diesem Kapitel für den Fall großer Deformationen vorgestellten Grundlagen zur Kontaktmechanik bilden die Ausgangsbasis zur Formulierung entsprechender Anfangs-Randwertprobleme, siehe Abschnitt 4.3. Neben der Überführung solch einer das Kontaktproblem beschreibenden Anfangs-Randwertaufgabe in eine integrale Formulierung, siehe Abschnitte 4.4.1 und 4.4.2, erfordert die numerische Lösung eines Kontaktproblems im Vergleich zu klassischen kontinuumsmechanischen Problemstellungen ohne Interfacekopplung zusätzliche Betrachtungen hinsichtlich der Erzwingung der Kontaktbedingungen (3.23) und (3.25) sowie der Oberflächendiskretisierung der Kontaktflächen. Beide Aspekte mit Bezug zur schwachen Form des Kontaktproblems und der hierauf applizierten Finite-Elemente-Methode werden in den nächsten Abschnitten ausführlich erörtert.

4 Formulierung von Anfangs-Randwertproblemen

Das Ziel dieses Kapitels ist es eine mathematische Beschreibung für die in der vorliegenden Arbeit behandelten Anfangs-Randwertprobleme anzugeben. Der erste Schritt zu diesem Vorhaben besteht zunächst darin, die das jeweilige Problem beschreibenden partiellen Differentialgleichungen mit dem gewählten Konstitutivmodell zusammenzutragen. Die Spezifikation zusätzlicher Anfangs- und Randbedingungen komplettiert die Definition eines Anfangs-Randwertproblems in einer lokal gültigen Fassung, der sogenannten starken Form des Anfangs-Randwertproblems. Im Allgemeinen ist es jedoch nicht möglich, den komplexen resultierenden Satz von Gleichungen einer analytischen Behandlung zugänglich zu machen. Stattdessen müssen numerische Verfahren zur Lösung des Anfangs-Randwertproblems herangezogen werden. In dieser Hinsicht hat sich die Methode der finiten Elemente als ein vielseitiges und leistungsfähiges Werkzeug zur Raumdiskretisierung bewährt. Die Basis für dieses numerische Näherungsverfahren bildet eine integrale bzw. variationelle Formulierung des Anfangs-Randwertproblems, die sogenannte schwache Form des Anfangs-Randwertproblems.

4.1 Starke Form von Anfangs-Randwertproblemen

Ein allgemeines Anfangs-Randwertproblem (ARWP) für das thermomechanisch gekoppelte Zweifeldproblem besteht aus der in Kapitel 2 aufgestellten Bilanzgleichung (2.78) für den Impuls, der Spannungsbeziehung (2.177), mit den zugehörigen Entwicklungsgleichungen (2.178) für die inneren Variablen, sowie unter Einbeziehung zusätzlicher Konstitutivannahmen, wie z. B. dem Fourierschen Wärmeleitungsgesetz (2.180), aus der verallgemeinerten Wärmeleitungsgleichung (2.182). Zur Komplettierung des Anfangs-Randwertproblems bedarf es noch der Angabe von Anfangs- und Randbedingungen, also der Spezifikation zusätzlicher Informationen für die Bewegung und das Temperaturfeld des materiellen Körpers \mathcal{B} . Exemplarisch wird das resultierende partielle Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung, die sogenannte starke Form, mit dem zu erfüllenden Satz von Anfangs- und Randbedingungen nur in der Referenzkonfiguration dargestellt. Der Vollständigkeit wegen sei erwähnt, dass die räumliche Beschreibung des ARWP absolut gleichwertig ist. Die Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = t_0$ in materieller

Darstellung lauten:

$$\vec{u}(\vec{X}, t_0) = \vec{u}_0(\vec{X}) \quad \forall \vec{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.1)$$

$$\vec{v}(\vec{X}, t_0) = \vec{v}_0(\vec{X}) \quad \forall \vec{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.2)$$

$$\Theta(\vec{X}, t_0) = \Theta_0(\vec{X}) \quad \forall \vec{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.3)$$

$$\mathbf{q}(\vec{X}, t_0) = \mathbf{q}_0(\vec{X}) \quad \forall \vec{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}] \quad (4.4)$$

Die ergänzenden Informationen auf der Berandung des materiellen Körpers, vgl. Abb. 4.1, können prinzipiell in drei Arten von Randbedingungen unterschieden werden. Die ers-

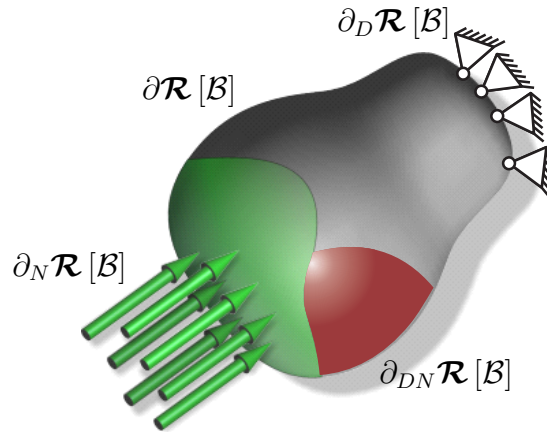


Abbildung 4.1: Aufteilung der Berandung $\partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ in die Bereiche $\partial_D\mathcal{R}[\mathcal{B}]$, $\partial_N\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ und $\partial_{DN}\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ zum Aufbringen von Dirichlet-, Neumann- und gemischten Randbedingungen

te Klasse, die sogenannten Dirichlet-Randbedingungen (geometrische bzw. wesentliche Randbedingungen)¹ auf $\partial_D\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$, $\partial_D\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_\Theta\mathcal{R}[\mathcal{B}]$, beschreiben das Verhalten der primären Feldvariablen \vec{u} auf $\partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ und Θ auf $\partial_\Theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$.² Dies schließt prinzipiell auch Überlappungen von $\partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ und $\partial_\Theta\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ ein, d. h. $\partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_\Theta\mathcal{R}[\mathcal{B}] \neq \emptyset$, sodass einem materiellen Punkt \vec{X} , $\vec{X} \in \partial_u\mathcal{R}[\mathcal{B}]$, $\vec{X} \in \partial_\Theta\mathcal{R}[\mathcal{B}]$, auf $\partial_D\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ sowohl eine Verschiebungs- als auch eine Temperaturrandbedingung zugeordnet werden kann. Beziehungen, welche die Richtungsableitungen der primären Feldvariablen einbeziehen, werden auf dem Neumann-Rand $\partial_N\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$, $\partial_N\mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_s\mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_q\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ definiert. Mit Bezug auf ein thermomechanisches ARWP bedeutet dies, dass solche natürlichen bzw. dynamischen Randbedingungen³ Vorgaben an die Spannungsvektoren auf $\partial_s\mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ und den Wärmefluss

¹Alternativ werden Dirichlet-Randbedingungen in der einschlägigen Fachliteratur auch als Randbedingungen erster Art bezeichnet, siehe z. B. [Quint, 2012].

²In der vorliegenden Arbeit werden im Rahmen eines thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems die zu berechnenden Feldvariablen \vec{u} und Θ auch als Primär- oder Lösungsvariablen bezeichnet, siehe hierzu auch Anmerkungen in Fußnote 80 aus Kapitel 3.

³Alternativ werden Neumann-Randbedingungen in der einschlägigen Fachliteratur auch als Randbedingungen zweiter Art bezeichnet, siehe z. B. [Quint, 2012].

auf $\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \subset \partial \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ stellen.⁴ Analog zu den Dirichlet-Randbedingungen ist auch hier eine Überlappung der Gebiete $\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ und $\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}]$, d. h. $\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \neq \emptyset$, möglich. Die dritte Klasse entspricht einer Kombination von Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen und wird daher häufig als gemischte Randbedingung⁵ bezeichnet. In der vorliegenden Arbeit werden lediglich gemischte thermische Randbedingungen, wie z. B. Konvektion, betrachtet, sodass $\partial_{DN} \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ gilt.

Ausgehend von einer disjunktiven Aufteilung des Gebietsrands des materiellen Körpers

$$\partial \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_D \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_N \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_{DN} \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.5)$$

$$\partial_D \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_N \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset, \quad \partial_N \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_{DN} \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset, \quad \partial_D \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_{DN} \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset,$$

bei der Überlappungen von Dirichlet-, Neumann- und gemischte Randbedingungen ausgeschlossen werden,⁶ gelten für die einzelnen Teiltränder folgende Zusammenhänge

$$\partial \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \partial_{\Theta} \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}],$$

mit

$$\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset, \quad (4.6)$$

$$\partial_{\Theta} \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset, \quad \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset, \quad \partial_{\Theta} \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cap \partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}] = \emptyset.$$

Die vorgegebenen Dirichlet-Randbedingungen innerhalb des offenen Zeitintervalls $\mathbb{I} =]t_0, t_e[$, mit $t \in \mathbb{I}$ und $t \in \mathbb{R}^+$, sind auf den einzelnen Teilträndern als

$$\vec{u}(\vec{X}, t) = \vec{\bar{u}}(\vec{X}, t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}, \quad (4.7)$$

$$\Theta(\vec{X}, t) = \bar{\Theta}(\vec{X}, t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_{\Theta} \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I} \quad (4.8)$$

⁴Die Neumann-Randbedingungen definieren über die Konstitutivbeziehungen (2.177), (2.178) und (2.180) sowie in Kombination mit den Cauchyschen Lemmata (2.48) und (2.54) einzuhaltende Zwänge an die Richtungsableitungen der primären Feldvariablen in Normalenrichtung.

⁵Alternativ werden gemischte Randbedingungen in der einschlägigen Fachliteratur auch als Randbedingungen dritter Art bezeichnet, siehe z. B. [Quint, 2012]. Obwohl in vielen Textbüchern zur Kontinuumsmechanik nicht präsent, kombinieren gemischte Randbedingungen die Primärvariable und dessen Ableitung in normaler Richtung auf einem Teilgebiet der Berandung. Typische Beispiele im Ingenieurbereich sind z. B. ein Balken, welcher an einem Ende durch eine Feder abgestützt wird, siehe [Meirovitch, 2001, S. 386]. Das am weitesten verbreite Beispiel für eine Randbedingung dritter Art ist das konvektive Aufheizen oder Abkühlen von Oberflächen, siehe [Bergman et al., 2011, S. 91] und [Greenberg, 1998, S. 952]. Falls die Verknüpfung der Primärvariablen und dessen normaler Richtungsableitung in Form einer Linearkombinationen, mit konstanten Koeffizienten, erfolgt, ist häufig auch von einer Robin-Randbedingung die Rede, siehe [Greenberg, 1998, S. 952]. In Bezug auf das Temperaturfeld ist eine allgemeine Robin-Randbedingung definiert als $C_1 \Theta + C_2 (\text{grad } \Theta \cdot \vec{n}) = C_3$, mit $C_1 = \text{const.}$, $C_2 = \text{const.}$ und $C_3 = \text{const.}$.

⁶Die Aussagen von Gl. (4.5) beinhalten, dass Kombinationen aus Dirichlet-, Neumann- und gemischten Randbedingungen nicht an identischen Positionen definiert werden dürfen. Da dies lediglich rein formal festgelegt wurde, kann mit Bezug auf eine komponentenweise Darstellung bei vektorwertigen Randbedingungen eine solche Beschränkung fallen gelassen werden. So darf beispielsweise die Vorgabe einer Verschiebungsrandbedingung und eines Spannungsvektors am selben materiellen Punkt erfolgen, solange jeweils nur eine Komponente dieser Vektoren definiert wird, siehe z. B. auch [Hartmann, 2003]. Im Gegensatz hierzu sind infolge der skalarwertigen Natur der thermischen Randbedingungen die Beschränkungen (4.6)₂ bis (4.6)₄ in Bezug auf die Spezifikationen von Temperaturinformationen auf dem Rand $\partial \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ nicht obligatorisch, sondern für eine konsistente Behandlung von thermischen Dirichlet-, Neumann- und gemischten Randbedingungen, die keinen physikalischen Widerspruch erzeugen, zwingend erforderlich.

definiert. Natürlicherweise werden die dynamischen Randbedingungen auf die Momentankonfiguration bezogen. Die Vorgabe des Cauchyschen Spannungsvektors und der Wärmeflussdichte resultieren in den deformationsabhängigen Aussagen⁷

$$\vec{t}(\vec{x}, t) = \mathbf{T}(\vec{x}, t) \vec{n}(\vec{x}, t) = \vec{f}_s(\vec{x}, t) \quad \forall \vec{x} \in \partial_s \chi_t[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}, \quad (4.9)$$

$$q(\vec{x}, t) = -\vec{q}(\vec{x}, t) \cdot \vec{n}(\vec{x}, t) = f_q(\vec{x}, t) \quad \forall \vec{x} \in \partial_q \chi_t[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}. \quad (4.10)$$

Aus der in Gl. (2.51) festgestellten Äquivalenz für den differentiellen Kraftvektor, welcher auf die materiellen Flächenelemente da und dA wirkt, sowie den Cauchy-Theoremen (2.48) und (2.50) folgt

$$\vec{t} = \mathbf{T} \vec{n} = \vec{t}_R \frac{dA}{da} = \mathbf{T}_R \vec{n}_R \frac{dA}{da}. \quad (4.11)$$

Ebenso gelingt es eine analoge Beziehung für den Wärmestrom

$$q = -\vec{q} \cdot \vec{n} = q_R \frac{dA}{da} = -\vec{q}_R \cdot \vec{n}_R \frac{dA}{da}. \quad (4.12)$$

aufzustellen. Hierdurch lassen sich die deformationsabhängigen Randbedingungen (4.9) und (4.10) unter Einbeziehung der Aussage (2.24) in der Referenzkonfiguration angeben.⁸ Es gilt:

$$\begin{aligned} \vec{t}_R(\vec{X}, t) &= \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) \vec{n}_R(\vec{X}, t) \\ &= (\det \mathbf{F}) \sqrt{\vec{n}_R \cdot \mathbf{C}^{-1} \vec{n}_R} \vec{f}_s(\vec{\chi}_R(\vec{X}, t), t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} q_R(\vec{X}, t) &= -\vec{q}_R(\vec{X}, t) \cdot \vec{n}_R(\vec{X}, t) \\ &= (\det \mathbf{F}) \sqrt{\vec{n}_R \cdot \mathbf{C}^{-1} \vec{n}_R} f_q(\vec{\chi}_R(\vec{X}, t), t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I} \end{aligned} \quad (4.14)$$

⁷Aus der alltäglichen Anschauung heraus leitet sich ab, dass im Rahmen einer geometrisch nichtlinearen Betrachtung dynamische Randbedingungen (Neumann-Randbedingungen) in Form von flächenverteilten mechanischen und thermischen Lasten auf der Momentankonfiguration wirken. Das Aufbringen solcher dynamischen Randbedingungen erfolgt also auf den deformationsabhängigen Teilrändern $\partial_s \chi_t[\mathcal{B}]$ und $\partial_q \chi_t[\mathcal{B}]$, welche als Teil des Lösungsprozesses bestimmt werden müssen. Infolgedessen sind bei der Spezifikation solcher Neumann-Randbedingungen neben dem einzuhaltenden Zwang an die Richtungsableitung der primären Feldvariablen in Normalenrichtung, also dem der Feldvariablen zugeordnetem physikalischen Fluss, implizit die Beschreibung der Deformation bzw. des Verschiebungsfeldes auf den Rändern $\partial_s \chi_t[\mathcal{B}]$ und $\partial_q \chi_t[\mathcal{B}]$ involviert. In Bezug auf die geometrisch nichtlineare Spannungsrandbedingung (4.9) darf jedoch nicht der falsche Eindruck entstehen, dass eine derartige Beziehung infolge der indirekten Kopplung zwischen dem, dem Verschiebungsfeld zugeordneten physikalischen Fluss, und dem Verschiebungsfeld selbst besser in die Kategorie der gemischten Randbedingungen einsortiert werden sollte. Dies ist ein Trugschluss. Wie Haupt [2002, S. 103] zeigt, hat die indirekte Kopplung von Gl. (4.9) mit der Deformation ihren Ursprung in einen zusätzlich einzuhaltenden Zwang $\partial f(\vec{x}, t)/\partial t + \vec{v}(\vec{x}, t) \cdot \text{grad } f(\vec{x}, t) = 0$, welcher aus einer impliziten Oberflächenbeschreibung $f(\vec{x}, t) = 0$, $f: \partial_s \chi_t[\mathcal{B}] \times \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{R}$, $\vec{x} \times t \mapsto f(\vec{x}, t)$, für $\partial_s \chi_t[\mathcal{B}]$ und dessen materiellen Zeitableitung $df(\vec{x}, t)/dt = 0$ resultiert. Dies entspricht nicht der klassischen Definition einer gemischten Randbedingung. Für weitere Erläuterungen sei auf [Haupt, 2002] verwiesen.

⁸Für umfangreiche wissenschaftliche Diskussionen zur algorithmischen Behandlung von richtungsabhängigen Lasten im Rahmen der Finite-Elemente-Methode sei auf [Schweizerhof und Ramm, 1984; Simo et al., 1991; Yosibash et al., 2007] verwiesen. In [Wriggers, 2008, S. 142–148] wird eine effiziente Methodik zur Implementation von richtungsabhängigen Druckrandbedingungen $\vec{t} = \vec{f}_s = p \vec{n}$, mit einer vorgegebenen Lastamplitude für den Druck p , vorgestellt. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass im Rahmen der von Wriggers [2008] verwendeten Vorzeichenkonvention $p > 0$ eine Zugbeanspruchung anzeigt. Im englischen Sprachraum tragen diese Lasten auch die Bezeichnung „follower loads“.

Für viele Ingenieursanwendungen erscheint auch der Einsatz sogenannter „toter Lasten“, bei denen die Richtungs- und Amplitudenabhängigkeit der dynamischen Randbedingungen von der Bewegung unberücksichtigt bleiben, ausreichend zu sein. Dabei wird von folgenden Approximationen

$$\vec{t}_R(\vec{X}, t) = \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) \vec{n}_R(\vec{X}, t) = \vec{f}_s(\vec{X}, t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}, \quad (4.15)$$

$$q_R(\vec{X}, t) = -\vec{q}_R(\vec{X}, t) \cdot \vec{n}_R(\vec{X}, t) = f_q(\vec{X}, t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}. \quad (4.16)$$

Gebrauch gemacht. Im Fall von kleinen Deformationen reduzieren sich die Ausdrücke (4.13) und (4.14) automatisch auf die angegebenen Näherungen (4.15) und (4.16). Für die folgenden Ausführungen werden deformationsabhängige und deformationsunabhängige Neumann-Randbedingungen durch die Ausdrücke

$$\vec{t}_R(\vec{X}, t) = \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) \vec{n}_R(\vec{X}, t) = \hat{\vec{f}}_s(\vec{X}, t), \quad \forall \vec{X} \in \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}, \quad (4.17)$$

$$q_R(\vec{X}, t) = -\vec{q}_R(\vec{X}, t) \cdot \vec{n}_R(\vec{X}, t) = \hat{f}_q(\vec{X}, t), \quad \forall \vec{X} \in \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I} \quad (4.18)$$

zusammengefasst. Eine Konkretisierung geschieht an den entsprechenden Stellen, falls erforderlich.

Die Festlegung der gemischten thermischen Randbedingungen erfolgt durch die Beziehung

$$q_R = -\vec{q}_R \cdot \vec{n}_R = \hat{f}_{\Theta q}(\vec{X}, \Theta, t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}, \quad (4.19)$$

wobei die Wärmeflussdichte q_R nun explizit durch die Oberflächentemperatur gekoppelt ist. Für den Fall finiter Deformationen entspricht auch hier die auf die Referenzkonfiguration bezogene Funktion

$$\hat{f}_{\Theta q}(\vec{X}, \Theta, t) = (\det \mathbf{F}) \sqrt{\vec{n}_R \cdot \mathbf{C}^{-1} \vec{n}_R} f_{\Theta q}(\vec{\chi}_R(\vec{X}, t), \Theta, t) \quad (4.20)$$

einem von der Bewegung des materiellen Körpers abhängigen Wärmefluss. Zu den bekanntesten Vertretern dieser Klasse zählt die Konvektion, die den Wärmetransport am Grenzübergang zwischen der Randschicht des materiellen Körpers $\partial_{\Theta q} \mathcal{X}_t[\mathcal{B}]$ und einem homogenen Transportmedium, z. B. einem an der Oberfläche vorbeiströmenden Fluid, durch den linearen Zusammenhang

$$f_{\Theta q} = \bar{q}_{\text{con}} = -h_c(\Theta - \Theta_f) \quad \forall \vec{x} \in \partial_{\Theta q} \mathcal{X}_t[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I}, \quad (4.21)$$

mit der Temperatur des umgebenden Fluids Θ_f und dem Wärmeübergangskoeffizienten h_c , modelliert.⁹ Eine alternative Möglichkeit zur Modellierung des Konvektionsstroms \bar{q}_{con} stellt die Fluid-Struktur-Interaktion dar, siehe [Hartmann et al., 2009c; Birken et al., 2010].

⁹Wird die Konvektionsrandbedingung in Bezug auf die Momentankonfiguration formuliert, resultiert die Beziehung $\vec{q} \cdot \vec{n} = h_c(\Theta - \Theta_f)$, wobei der Wärmeflussvektor $\vec{q} = -\kappa \text{grad } \Theta$ über das Fouriersche Wärmeleitungsgesetz (2.179) definiert ist. Unter der Voraussetzung $\kappa = \text{const.}$, $h_c = \text{const.}$, $\Theta_f = \text{const.}$ ergibt sich hieraus der Prototyp einer Robin-Randbedingung, d. h. $h_c/\kappa \Theta + \text{grad } \Theta \cdot \vec{n} = h_c/\kappa \Theta_f$.

Weiterhin erwähnenswert sind gemischte Temperaturrandbedingungen infolge von thermischer Strahlung, bei der die Differenz aus emittierter und absorbierter Wärmestrahlung eines materiellen Körpers sehr häufig durch das Stefan-Boltzmann-Gesetz

$$f_{\Theta_q} = \bar{q}_{\text{rad}} = -\epsilon\sigma(\Theta^4 - \Theta_\infty^4), \quad \forall \vec{x} \in \partial_{\Theta_q}\chi_t[\mathcal{B}] \wedge t \in \mathbb{I} \quad (4.22)$$

abgebildet wird.¹⁰ Hierbei kennzeichnet σ die Stefan-Boltzmann-Konstante, ϵ den Emissionsgrad des Körpers und Θ_∞ die Umgebungstemperatur.

Mit den oben angegebenen Anfangs- und Randbedingungen wird der Satz an Gleichungen zur Definition eines Anfangs-Randwertproblems komplettiert. Die starke Formulierung des nichtlinearen thermomechanisch gekoppelten Zweifeldproblems für eine Lagrangesche Betrachtungsweise ist in Tab. 4.1 zusammengestellt. Im Rahmen der kinematisch linearen Theorie stellt sich unter Beachtung der in Abschnitt 2.4 vorgestellten Vereinheitlichungen das thermomechanische ARWP in Gestalt von Tab. 4.2 dar. Im Bereich kleiner Deformationen entfällt eine Unterscheidung zwischen Koordinaten der Referenz- und Momentankonfiguration, der Dichte sowie der dynamischen Größen. Um eine zur geometrisch exakten Theorie abgrenzende Nomenklatur zu prägen, seien die deformationsunabhängigen Volumen- und Oberflächenintegrationsgebiete durch Ω , Γ_u , Γ_Θ , Γ_s , Γ_q , Γ_{Θ_q} gekennzeichnet. Gültige Approximationen der Konstitutivbeziehungen bzw. Materialfunktionen innerhalb der infinitesimalen Verzerrungstheorie reflektieren die Gl. (2.185) bis (2.188).

Analytische Lösungen für die allgemeinen in den Tab. 4.1 und 4.2 spezifizierten Problemklassen existieren zumeist nur für wenige Spezialfälle, welche Einschränkungen an der Geometrie, dem Konstitutivmodell und sonstigen physikalischen Annahmen unterliegen. Daher kommen zur näherungsweisen Berechnung des gekoppelten Systems von partiellen Differentialgleichungen fast ausschließlich numerische Diskretisierungsverfahren zum Einsatz. Die Überführung der lokalen Form des ARWPs in die im nächsten Abschnitt 4.2 vorgestellte schwache Formulierung bildet die Basis für die in Abschnitt 5.1 erläuterte Finite-Elemente-Methode.

4.2 Variationsformulierungen von Anfangs-Randwertproblemen

In diesem Abschnitt soll die Basis für die Lösung der gekoppelten partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen (2.78), (2.178) und (2.182) mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode skizziert werden. Hierzu sind die in Tab. 4.1 oder Tab. 4.2 definierten Anfangs-Randwertprobleme in eine sogenannte schwache Form bzw. Variationsformulierung zu transformieren. Zur Herleitung solch einer Variationsformulierung werden die partiellen Differentialgleichungssysteme mit Test- bzw. Gewichtungsfunktionen, den sogenannten Variationen, multipliziert und anschließend über das gesamte betrachtete Gebiet integriert.

¹⁰Die in der Momentankonfiguration formulierte gemischte Randbedingung zur Wiedergabe der thermischen Strahlung $\vec{q} \cdot \vec{n} = \epsilon\sigma(\Theta^4 - \Theta_\infty^4)$ lässt sich aufgrund des nichtlinearen Temperaturterms $\epsilon\sigma\Theta^4$ nicht in eine Robin-Randbedingung überführen, sondern repräsentiert einen Vertreter für eine nichtlineare Randbedingung dritter Art.

Tabelle 4.1: Starke Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems bezogen auf die Referenzkonfiguration

Gesucht sind das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{X}, t)$ und das Temperaturfeld $\Theta(\vec{X}, t)$, sodass		
$\varrho_R \ddot{\vec{u}} = \text{Div } \mathbf{T}_R + \varrho_R \vec{k}$	auf $\mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(2.78)
$c_p \dot{\Theta} = -\frac{1}{\varrho_R} \text{Div } \vec{q}_R + p_\Theta + r_\Theta$	auf $\mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(2.182)
$\dot{\mathbf{q}} = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q})$	auf $\mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(2.178)
die Anfangsbedingungen,		
$\vec{u}(\vec{X}, t_0) = \vec{u}_0(\vec{X}), \quad \dot{\vec{u}}(\vec{X}, t_0) = \vec{v}_0(\vec{X})$	$\forall \vec{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}],$	(4.1, 4.2)
$\Theta(\vec{X}, t_0) = \Theta_0(\vec{X}), \quad \mathbf{q}(\vec{X}, t_0) = \mathbf{q}_0(\vec{X})$	$\forall \vec{X} \in \mathcal{R}[\mathcal{B}],$	(4.3, 4.4)
die Randbedingungen,		
$\vec{u}(\vec{X}, t) = \bar{\vec{u}}(\vec{X}, t)$	auf $\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(4.7)
$\Theta(\vec{X}, t) = \bar{\Theta}(\vec{X}, t)$	auf $\partial_\Theta \mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(4.8)
$\vec{t}_R(\vec{X}, t) = \mathbf{T}_R \vec{n}_R = \hat{f}_s(\vec{X}, t)$	auf $\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(4.17)
$q_R(\vec{X}, t) = -\vec{q}_R \cdot \vec{n}_R = \hat{f}_q(\vec{X}, t)$	auf $\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(4.18)
$q_R(\vec{X}, t) = -\vec{q}_R \cdot \vec{n}_R = \hat{f}_{\Theta q}(\vec{X}, \Theta(\vec{X}, t), t)$	auf $\partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}] \times \mathbb{I}$,	(4.19)
und die zugehörigen konstitutiven Beziehungen		
$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\Phi}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q}),$	mit $\tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T}_R,$	(2.177, 2.53)
$\vec{q}_R = -\kappa_R \text{Grad } \Theta,$	mit $\kappa_R = \hat{\kappa}(\Theta) J \mathbf{C}^{-1},$	(2.180)
$c_p = \hat{c}_p(\Theta, J),$	$p_\Theta = \hat{p}_\Theta(\mathbf{E}, \dot{\mathbf{E}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$	(2.183, 2.184)
unter Berücksichtigung der kinematischen Beziehungen		
$\mathbf{H} = \text{Grad } \vec{u},$	$\mathbf{F} = \mathbf{1} + \mathbf{H}, \quad J = \det \mathbf{F},$	(2.26, 2.27)
$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F},$	$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1})$	(2.29, 2.34)
erfüllt sind.		

Tabelle 4.2: Starke Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems im Rahmen der geometrisch linearen Theorie

Gesucht sind das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{x}, t)$ und das Temperaturfeld $\Theta(\vec{x}, t)$, sodass		
$\rho \ddot{\vec{u}} = \text{div } \mathbf{T} + \rho \vec{k}$	auf $\Omega \times \mathbb{I}$,	(2.150)
$c_p \dot{\Theta} = -\frac{1}{\rho} \text{div } \vec{q} + p_\Theta + r_\Theta$	auf $\Omega \times \mathbb{I}$,	(2.187)
$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{r}(\mathbf{E}_L, \Theta, \mathbf{q})$	auf $\Omega \times \mathbb{I}$,	(2.186)
die Anfangsbedingungen,		
$\vec{u}(\vec{x}, t_0) = \vec{u}_0(\vec{x}), \quad \dot{\vec{v}}(\vec{x}, t_0) = \vec{v}_0(\vec{x})$	$\forall \vec{x} \in \Omega,$	
$\Theta(\vec{x}, t_0) = \Theta_0(\vec{x}), \quad \mathbf{q}(\vec{x}, t_0) = \mathbf{q}_0(\vec{x})$	$\forall \vec{x} \in \Omega,$	
die Randbedingungen,		
$\vec{u}(\vec{x}, t) = \bar{\vec{u}}(\vec{x}, t)$	auf $\Gamma_u \times \mathbb{I}$,	
$\Theta(\vec{x}, t) = \bar{\Theta}(\vec{x}, t)$	auf $\Gamma_\Theta \times \mathbb{I}$,	
$\vec{t}(\vec{x}, t) = \mathbf{T} \vec{n} = \vec{f}_s(\vec{x}, t)$	auf $\Gamma_s \times \mathbb{I}$,	
$q(\vec{x}, t) = -\vec{q} \cdot \vec{n} = f_q(\vec{x}, t)$	auf $\Gamma_q \times \mathbb{I}$,	
$q(\vec{x}, t) = -\vec{q} \cdot \vec{n} = f_{\Theta q}(\vec{x}, \Theta(\vec{x}, t), t)$	auf $\Gamma_{\Theta q} \times \mathbb{I}$,	
und die zugehörigen konstitutiven Beziehungen		
$\mathbf{T} = \mathbf{h}(\mathbf{E}_L, \Theta, \mathbf{q}),$	$\vec{q} = -\hat{\kappa}(\Theta) \text{grad } \Theta,$	(2.185, 2.179)
$c_p = \hat{c}_p(\varepsilon_{Lv}, \Theta),$	$p_\Theta = \hat{p}_\Theta(\mathbf{E}_L, \dot{\mathbf{E}}_L, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}),$	(2.188)
unter Berücksichtigung der kinematischen Beziehungen		
$\mathbf{E}_L = \frac{1}{2}(\text{grad } \vec{u} + \text{grad}^T \vec{u})$	$\varepsilon_{Lv} = \text{tr } \mathbf{E}_L$	(2.135, 2.137)
erfüllt sind.		

Die bis zu diesem Punkt geschilderte Prozedur trägt auch die Bezeichnung Methode der gewichteten Residuen, siehe [Zienkiewicz et al., 2013, S. 51]. Zur Reduktion der Kontinuitätsanforderungen der Lösung findet zusätzlich der Gaußsche Integralsatz Anwendung. Die Operation erniedrigt die Anforderung an die Differenzierbarkeit der Lösung um eine Ordnung und erweitert auf diese Weise den zulässigen Satz der zu approximierenden Gewichtungs- und Lösungsfunktionen. Der Einfachheit halber werden die Variationsformulierungen in den Abschnitten 4.2.1 bis 4.2.3 zunächst ohne Berücksichtigung von Kontaktinteraktionen vorgestellt.

4.2.1 Schwache Form der Impulsbilanz

Obwohl eine Vielzahl anderer Variationsformulierungen existiert, wird im folgenden Abschnitt ausschließlich das wissenschaftlich oft zitierte Variationsprinzip, das sogenannte Prinzip von D'Alembert,¹¹ abgeleitet. Für die Transformation der lokalen Impulsbilanz (2.78) in die schwache Form ist es erforderlich, zunächst beliebige, von der Zeit unabhängige Test- bzw. Gewichtungsfunktionen $\delta \vec{u}(\vec{X}) \in \mathcal{V}_u$ aus dem folgenden zulässigen Satz von Funktionen

$$\mathcal{V}_u := \left\{ \delta \vec{u}: \mathcal{R}[\mathcal{B}] \rightarrow \mathbb{V}^3 \mid \delta \vec{u} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{R}[\mathcal{B}]), \delta \vec{u}(\vec{X}) = \vec{0} \text{ für } \vec{X} \in \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}] \right\} \quad (4.23)$$

einzuführen. $\mathcal{H}^1(\mathcal{R}[\mathcal{B}])$ kennzeichnet hier einen Sobolev-Funktionsraum,¹² der sich auf dem Gebiet $\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ aus allen vektorwertigen Funktionen mit quadratisch integrierbaren Funktionswerten und partiellen Ableitungen erster Ordnung zusammensetzt.¹³ Des Weiteren sollen die als virtuelle Verschiebungen bezeichneten Testfunktionen $\delta \vec{u}(\vec{X})$ auf dem Dirichlet-Rand $\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ verschwinden (homogene Randbedingungen).¹⁴ Wie im

¹¹Im Fall der Statik soll in Anlehnung an Haupt [2002] für die Variationsformulierung die Bezeichnung Prinzip der virtuellen Verschiebungen (PvV) verwendet werden.

¹²Für gewöhnlich kann jedem Sobolev-Funktionsraum auch ein entsprechender Hilbert-Funktionsraum zugeordnet werden, siehe [Hughes, 2000].

¹³Die Menge quadratisch integrierbarer Funktionen auf dem Gebiet $\mathcal{R}[\mathcal{B}]$ entspricht dem \mathcal{L}^2 -Raum (Lebesgue-Raum) $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}[\mathcal{B}])$, der durch das innere Produkt

$$\langle \vec{f}, \vec{f} \rangle_{\mathcal{L}^2} = \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{f}(\vec{X}) \cdot \vec{f}(\vec{X}) \, dV \quad (4.24)$$

ausgestattet ist und der Einschränkung $\langle \vec{f}, \vec{f} \rangle_{\mathcal{L}^2} < \infty$ unterliegt. Nach Hughes [2000] impliziert die Definition (4.24) die Restriktion

$$\langle \vec{f}, \vec{f} \rangle_{\mathcal{L}^2} + \sum_{i=1}^3 \langle \partial \vec{f} / \partial X_i, \partial \vec{f} / \partial X_i \rangle_{\mathcal{L}^2} < \infty \quad (4.25)$$

an den Sobolev-Raum $\mathcal{H}^1(\mathcal{R}[\mathcal{B}])$. Für weiterführende Details zur umfassenden Thematik über Lösungsräume der Primärvariable und dessen Funktionsraum für die virtuelle Feldvariable im Kontext zu schwachen Formulierungen von ARWP sei auf [Hughes, 2000] verwiesen.

¹⁴Mit anderen Worten an die Testfunktionen $\delta \vec{u}(\vec{X})$ wird die Erfüllung von homogenen Randbedingungen (homogenen Dirichlet-Randbedingungen) auf $\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ gefordert. Es sei an dieser Stelle explizit darauf hingewiesen, dass die Termini homogene und homogenisierte Randbedingungen nicht äquivalent

weiteren Verlauf gezeigt wird, stellt diese Eigenschaft die automatische Erfüllung der Verschiebungsrandbedingungen auf $\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ sicher.

Die Umformungsprozedur von Gl. (2.78) beginnend mit der Multiplikation der virtuellen Verschiebungen und der Integration über das vollständige Gebiet in der Referenzkonfiguration sowie die Substitution der materiellen Zeitableitung des Geschwindigkeitsfeldes $\vec{v}(\vec{X}, t)$ durch Gl. (2.16) resultiert in

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R(\vec{X}) \ddot{\vec{u}}(\vec{X}, t) \cdot \delta \vec{u}(\vec{X}) dV - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \text{Div } \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) \cdot \delta \vec{u}(\vec{X}) dV \\ - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R(\vec{X}) \vec{k}(\vec{X}, t) \cdot \delta \vec{u}(\vec{X}) dV = 0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Die Identität

$$\text{Div } \mathbf{T}_R \cdot \delta \vec{u} = \text{Div} (\mathbf{T}_R^T \delta \vec{u}) - \mathbf{T}_R \cdot \text{Grad } \delta \vec{u} \quad (4.27)$$

und die hieran anknüpfende Nachschaltung des Divergenztheorems in Kombination mit dem Cauchyschen Lemma (2.50) führen auf

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R \ddot{\vec{u}} \cdot \delta \vec{u} dV + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \mathbf{T}_R \cdot \text{Grad } \delta \vec{u} dV - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R \vec{k} \cdot \delta \vec{u} dV - \int_{\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{t}_R \cdot \delta \vec{u} dA = 0. \quad (4.28)$$

Dieser Umformungsschritt erniedrigt die höchste Ableitung um eine Ordnung im Vergleich zur starken Form des ARWP, sodass die Stetigkeitsanforderungen an das Verschiebungsfeld reduziert werden. Der vektorwertige Lösungsraum für die Primärvariable ist daher definiert als

$$\mathcal{S}_{u,t} := \left\{ \vec{u}: \mathcal{R}[\mathcal{B}] \rightarrow \mathbb{V}^3 \mid \vec{u} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{R}[\mathcal{B}]), \vec{u}(\vec{X}, t) = \bar{\vec{u}}(\vec{X}, t) \text{ für } \vec{X} \in \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}] \right\}. \quad (4.29)$$

Die zusätzliche Restriktion in Gl. (4.29) drückt die Erfüllung der zeitabhängigen Verschiebungsrandbedingungen auf $\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ aus, weshalb der Lösungsraum $\mathcal{S}_{u,t}$ im Gegensatz zu dem Gewichtungsraum \mathcal{V}_u auch von der Zeit t abhängt. Die Wahl eines Standard-Galerkin-Ansatzes zur Raumdiskretisierung in Abschnitt 5.1, d. h. die Wahl identischer Funktionsklassen für \vec{u} und $\delta \vec{u}$, begründet die getroffene Festlegung für \mathcal{V}_u und $\mathcal{S}_{u,t}$. Als Konsequenz der homogenen Randbedingungen für $\delta \vec{u}(\vec{X})$ auf $\partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ wird das Oberflächenintegral lediglich über die Berandung $\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ ausgewertet. Die deformationsabhängigen bzw. deformationsunabhängigen Neumann-Randbedingungen (4.17) werden in der schwachen Formulierung (4.28) im integralen Mittel erfüllt.

Aufgrund der in Abschnitt 2.5 postulierten Struktur der Konstitutivmodelle ist es zweckmäßig unter Berücksichtigung der Transformationsbeziehung $\mathbf{T}_R = \mathbf{F} \tilde{\mathbf{T}}$, siehe Tab. 2.1,

sind. Von homogenisierten Randbedingungen erster Art (homogenisierte Dirichlet-Randbedingungen) wird gesprochen, wenn es beispielsweise gelingt, die Variationsformulierung des betrachteten Anfangs-Randwertproblems mit inhomogenen Dirichlet-Randbedingungen in eine kongruente schwache Form mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen zu überführen, siehe z. B. [Jung und Langer, 2013].

und der Symmetrieeigenschaft des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors $\tilde{\mathbf{T}}$, das Skalarprodukt für die innere virtuelle Spannungsarbeit durch

$$\mathbf{T}_R \cdot \text{Grad } \delta \vec{u} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot (\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \vec{u}) = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \vec{u} + \text{Grad}^T \delta \vec{u} \mathbf{F}) \quad (4.30)$$

auszudrücken. Der rechte symmetrische Tensorausdruck in Gl. (4.30)₃ kennzeichnet dabei die Variation des Greenschen Verzerrungstensors $\delta \mathbf{E}$, welche mit dem Gateaux-Differential in Richtung des virtuellen Verschiebungsfeldes $\delta \vec{u}$ übereinstimmt:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{E} &= D_{\vec{u}} \mathbf{E} [\delta \vec{u}] = \frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{1}{2} (\mathbf{F} + \epsilon \text{Grad } \delta \vec{u})^T (\mathbf{F} + \epsilon \text{Grad } \delta \vec{u} - \mathbf{1}) \right] \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \vec{u} + \text{Grad}^T \delta \vec{u} \mathbf{F}) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Damit kann das Prinzip von D'Alembert in der materiellen Darstellung mit der vereinfachten Notation

$$\begin{aligned} \delta \pi_u(t, \vec{u}, \ddot{\vec{u}}, \Theta, \mathbf{q}, \delta \vec{u}) &= \\ &\underbrace{\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R \ddot{\vec{u}} \cdot \delta \vec{u} dV}_{\delta \pi_{\text{kin}}} + \underbrace{\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} dV}_{\delta \pi_{\text{int}}} - \underbrace{\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_R \vec{k} \cdot \delta \vec{u} dV - \int_{\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{t}_R \cdot \delta \vec{u} dA}_{-\delta \pi_{\text{ext}} = -\delta \pi_{\text{ext}\mathcal{B}} - \delta \pi_{\text{ext}\delta \mathcal{B}}} = 0 \end{aligned} \quad (4.32)$$

wiedergegeben werden. In Analogie zur mechanischen Energiebilanz (2.96) lassen sich in der skalaren Aussage (4.32) drei unterschiedliche Variationsanteile identifizieren. Der erste Summand repräsentiert die kinetische virtuelle Arbeit $\delta \pi_{\text{kin}}$, der zweite skalare Term kennzeichnet die innere virtuelle Arbeit $\delta \pi_{\text{int}}$ und die letzten beiden Summanden werden in der externen virtuellen Arbeit $\delta \pi_{\text{ext}}$ vereinigt. Zudem teilt sich die externe virtuelle Arbeit $\delta \pi_{\text{ext}}$ in die Anteile $\delta \pi_{\text{ext}\mathcal{B}}$ und $\delta \pi_{\text{ext}\delta \mathcal{B}}$ auf, die dem jeweiligen Volumen- bzw. Oberflächenintegral zugeordnet werden können. Zusammenfassend lässt sich konstatieren, dass das D'Alembertsche Prinzip einem allgemeingültigen Variationsprinzip entspricht, welches nicht notwendigerweise die Existenz eines zugrunde liegenden Potentials voraussetzt. Damit ist die Variationsformulierung für die Impulsbilanz (4.32) auf eine breite Problemklasse, die beliebige inelastische Materialmodelle oder auch nicht konservative Lasten umfassen kann, anwendbar.

Gelingt der Nachweis eines zugehörigen Potentials $\pi_u(\vec{u}, \Theta)$, kann Gl. (4.32) alternativ durch die totale Variation bzw. das Gateaux-Differential des Potentials, d. h. $\delta \pi_u = D_{\vec{u}} \pi_u [\delta \vec{u}] = \frac{d}{d\epsilon} \pi_u(\vec{u} + \epsilon \delta \vec{u}, \Theta) \Big|_{\epsilon=0}$, konstruiert werden. Die Forderung nach Stationarität des Energiefunktionals π_u , also $\delta \pi_u = 0$, vervollständigt die Konstruktionsvorschrift.¹⁵ Potentialbeziehungen existieren allerdings zumeist nur für spezielle Systeme, wie z. B. konservative Systeme. Folglich ist formal zu prüfen, dass die resultierenden Extremalprinzipien in die zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen (Euler-

¹⁵Bezogen auf rein mechanische, quasistatische Problemstellungen wird das Prinzip der virtuellen Verschiebungen häufig mit Hilfe des Prinzips vom Minimum des Gesamtpotentials motiviert, siehe hierzu [Knothe und Wessels, 2017].

Lagrange Gleichungen) übergehen sowie eventuell in das Energiefunktional integrierte Nebenbedingungen lokal erfüllt sind, siehe z. B. [Simo et al., 1985a; Simo und Taylor, 1991; Simo und Armero, 1992]. Die Anwendung des Variationsprinzips wird damit für sämtliche Probleme innerhalb der betrachteten Problemklasse, auch für solche denen kein Potential π_u zugeordnet werden kann, sichergestellt. Die Wahl einer derartigen Verfahrensweise ermöglicht die Konstruktion von Extremalprinzipien bzw. erlaubt hinsichtlich der Raumdiskretisierung mittels der Methode der finiten Elemente die Entwicklung von effizienten Elementformulierungen, z. B. sogenannter gemischter Finite-Elemente-Formulierungen.¹⁶

Die schwache Form der Impulsbilanz in der Momentankonfiguration

$$\delta\pi_u(t, \vec{u}, \ddot{\vec{u}}, \Theta, \mathbf{q}, \delta\vec{u}) = \underbrace{\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho \ddot{\vec{u}} \cdot \delta\vec{u} dv}_{\delta\pi_{\text{kin}}} + \underbrace{\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \mathbf{T} \cdot \text{sym} \delta\mathbf{h} dv}_{\delta\pi_{\text{int}}} - \underbrace{\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho \vec{k} \cdot \delta\vec{u} dv - \int_{\partial_s \chi_t[\mathcal{B}]} \vec{t} \cdot \delta\vec{u} da}_{-\delta\pi_{\text{ext}} = -\delta\pi_{\text{ext}\mathcal{B}} - \delta\pi_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}} = 0 \quad (4.33)$$

geht aus der Anwendung der Transformationsbeziehungen (2.25), (2.51), (2.53) und (2.70) sowie der Kettenregel $\text{Grad } \delta\vec{u} = (\text{grad } \delta\vec{u}) \mathbf{F}$ auf Gl. (4.32) hervor. Des Weiteren symbolisiert

$$\text{sym} \delta\mathbf{h} = \frac{1}{2} (\text{grad } \delta\vec{u} + \text{grad}^T \delta\vec{u}) \quad (4.34)$$

den symmetrischen Anteil des räumlichen Gradienten der virtuellen Verschiebungen $\delta\mathbf{h} = \text{grad } \delta\vec{u}$, siehe auch [Wriggers, 2008, S. 134–135]. Der Wechsel der Variablen von materiellen zu räumlichen Koordinaten in Gl. (4.33) impliziert zusätzlich die Definition von zeitabhängigen Variationen $\delta\vec{u}(\vec{x}) = \delta\vec{u}(\vec{\chi}_R(\vec{X}, t))$ in der Momentankonfiguration, welche eine Anpassung des Funktionsraums \mathcal{V}_u , siehe Gl. (4.23), erfordern. Für weitere Details hierzu wird auf [Simo und Hughes, 1998, S. 262–266] referiert.

4.2.2 Schwache Form der Wärmeleitungsgleichung

Die Überführung der lokalen Energiebilanz (2.104) in die verallgemeinerte Wärmeleitungsgleichung (2.182) wurde bereits in Abschnitt 2.3.4 gezeigt. Der in Form einer partiellen Differentialgleichung vorliegende Ausdruck für das Temperaturfeld (2.182) soll nun in Analogie zum vorherigen Abschnitt 4.2.1 ebenfalls in eine schwache Form in Bezug auf die Referenzkonfiguration überführt werden. Dies erfordert erneut die Definition beliebiger, zeitlich konstanter Gewichtungsfunktionen $\delta\Theta(\vec{X}) \in \mathcal{V}_\Theta$ aus dem zulässigen Satz von Funktionen

$$\mathcal{V}_\Theta := \left\{ \delta\Theta: \mathcal{R}[\mathcal{B}] \rightarrow \mathbb{R}^+ \mid \delta\Theta \in \mathcal{H}^1(\mathcal{R}[\mathcal{B}]), \delta\Theta(\vec{X}) = 0 \quad \forall \vec{X} \in \partial_\Theta \mathcal{R}[\mathcal{B}] \right\}, \quad (4.35)$$

sodass die Verträglichkeit mit den zugehörigen Dirichlet-Randbedingungen gewährleistet ist. Der Lösungsraum für die primäre Feldvariable Θ ist definiert als

$$\mathcal{S}_{\Theta,t} := \left\{ \Theta: \mathcal{R}[\mathcal{B}] \rightarrow \mathbb{R}^+ \mid \Theta \in \mathcal{H}^1(\mathcal{R}[\mathcal{B}]), \Theta(\vec{X}, t) = \bar{\Theta}(\vec{X}, t) \quad \forall \vec{X} \in \partial_\Theta \mathcal{R}[\mathcal{B}] \right\}, \quad (4.36)$$

¹⁶Für einen umfassenden Überblick zu dieser Thematik sei auf [Carstensen und Wriggers, 2009] verwiesen.

wobei auch hier die Stetigkeitsanforderungen an das Temperaturfeld reduziert werden.

In Anlehnung an Abschnitt 4.2.1 wird die abzuleitende Variationsformulierung als Prinzip der virtuellen Temperaturen (PvT) bezeichnet und die Testfunktionen $\delta\Theta(\vec{X})$ als virtuelle Temperaturen interpretiert. Der erste Transformationsschritt von Gl. (2.182), welcher die Multiplikation mit dem virtuellen Temperaturfeld und die Integration über das Volumen beinhaltet, führt auf

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\text{R}} c_{\text{p}} \dot{\Theta} \delta\Theta \, dV = - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} (\text{Div } \vec{q}_{\text{R}}) \delta\Theta \, dV + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\text{R}} p_{\Theta} \delta\Theta \, dV. \quad (4.37)$$

In identischer Vorgehensweise zu Abschnitt 4.2.1 liefert die Anwendung der Produktregel

$$\text{Div } \vec{q}_{\text{R}} \delta\Theta = \text{Div}(\delta\Theta \vec{q}_{\text{R}}) - \vec{q}_{\text{R}} \cdot \text{Grad } \delta\Theta, \quad (4.38)$$

des Gaußschen Integralsatzes (2.62) und die Berücksichtigung des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes (2.180) das Variationsprinzip in der materiellen Darstellung

$$\begin{aligned} \overbrace{\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\text{R}} c_{\text{p}} \dot{\Theta} \delta\Theta \, dV}^{\delta\pi_{c_{\text{p}}}} + \overbrace{\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \kappa_{\text{R}} \text{Grad } \Theta \cdot \text{Grad } \delta\Theta \, dV}^{\delta\pi_{\kappa}} = \\ - \overbrace{\int_{\partial_{\text{q}} \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_{\Theta_{\text{q}}} \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{q}_{\text{R}} \cdot \vec{n}_{\text{R}} \delta\Theta \, dA}^{\delta\pi_q} + \overbrace{\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\text{R}} p_{\Theta} \delta\Theta \, dV}^{\delta\pi_{r_{\Theta}}}, \end{aligned} \quad (4.39)$$

wobei die homogenen Dirichlet-Randbedingungen für $\delta\Theta(\vec{X})$ die Oberflächenintegration auf die Randgebiete $\partial_{\text{q}} \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ und $\partial_{\Theta_{\text{q}}} \mathcal{R}[\mathcal{B}]$ eingrenzen. Analog zu Abschnitt 4.2.1 stellt die Definition (4.35) von \mathcal{V}_{Θ} die Erfüllung der Temperaturrandbedingungen sicher, während die dynamischen Randbedingungen in die Variationsformulierung (4.39) direkt eingearbeitet sind. Die beteiligten Materialfunktionen für die spezifische Wärmekapazität c_{p} , den thermischen Konduktivitätstensor κ_{R} und den thermomechanischen Kopplungsterm p_{Θ} sind im Allgemeinen vom Temperaturfeld und der Deformation abhängig. Der nichtlineare Wärmeproduktionsterm p_{Θ} , siehe Gl. (2.184), korreliert zusätzlich noch mit den inneren Variablen des Konstitutivmodells und den zugehörigen Raten der abhängigen Variablen. Zum Zweck einer überschaubaren Partitionierung wird auch für Gl. (4.39) eine Kennzeichnung der einzelnen Summanden in $\delta\pi_{c_{\text{p}}}$, $\delta\pi_{\kappa}$, $\delta\pi_q$ und $\delta\pi_{r_{\Theta}}$ vorgenommen.

Das Variationsprinzip der Wärmeleitungsgleichung in Bezug auf Größen in der Momentankonfiguration ergibt sich durch die Anwendung der Transformationsbeziehungen (2.25), (2.55) und (2.70), des Zusammenhangs $\text{Grad } \Theta = \mathbf{F}^{\text{T}} \text{grad } \Theta$ sowie der Konstitutiv-

annahme (2.181) zu

$$\begin{aligned} \overbrace{\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho c_p \dot{\Theta} \delta \Theta \, dv}^{\delta \pi_{c_p}} + \overbrace{\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \operatorname{grad} \Theta \cdot \operatorname{grad} \delta \Theta \, dv}^{\delta \pi_{\kappa}} = \\ - \overbrace{\int_{\partial_q \chi_t[\mathcal{B}] \cup \partial_{\Theta q} \chi_t[\mathcal{B}]} \vec{q} \cdot \vec{n} \delta \Theta \, da}^{\delta \pi_q} + \overbrace{\int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \varrho p_{\Theta} \delta \Theta \, dv}^{\delta \pi_{r_{\Theta}}} . \quad (4.40) \end{aligned}$$

Werden die einzelnen Variationsanteile in der Größe $\delta \pi_{\Theta} = \delta \pi_{c_p} + \delta \pi_{\kappa} - \delta \pi_q - \delta \pi_{r_{\Theta}}$ zusammengefasst, lassen sich die beiden Variationsprinzipien (4.39) und (4.40) in kompakter Darstellung als

$$\delta \pi_{\Theta}(t, \vec{u}, \dot{\vec{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \delta \Theta) = 0 \quad (4.41)$$

schreiben.

4.2.3 Schwache Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems

Die simultane Erfüllung der variationellen Beziehungen (4.32) und (4.39) in der Referenzkonfiguration bzw. der Variationsformulierungen (4.33) und (4.40) in der Momentankonfiguration mündet in der schwachen Formulierung des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems. Für eine detailliertere Problembeschreibung sei auf [Quint, 2012; Hamkar, 2013] sowie die dort zitierte Literatur referiert. Durch die Definition der Lösungs- und Gewichtungsräume für die primären Feldvariablen und den zugehörigen Variationen wird die Verträglichkeit mit den Dirichlet-Randbedingungen sichergestellt, während die natürlichen Randbedingungen direkt in den Variationsprinzipien eingebettet sind. Komplettiert wird die schwache Form jedoch erst durch die Präzisierung der Anfangsbedingungen (4.1) bis (4.3), welche nun ebenfalls als skalare Variationsbeziehungen (4.42) bis (4.44) in die Problembeschreibung aufgenommen werden, siehe hierzu [Fritzen, 1997; Hughes, 2000]. Das vollständig variationell formulierte Anfangs-Randwertproblem in Bezug auf die Referenzkonfiguration ist in Tab. 4.3 zusammengefasst. Trotz der unterschiedlichen Differenzierbarkeitsanforderungen kann formal gezeigt werden, dass jede Lösung der starken Form aus Tab. 4.1 auch eine Lösung der in Tab. 4.3 angegebenen schwachen Form und umgekehrt darstellt. Für einen Beweis sollte der interessierte Leser das Buch von Hughes [2000] konsultieren.

Da in der vorliegenden Arbeit auch Problemstellungen im Rahmen der kinematisch linearen Theorie, siehe Abschnitt 2.4, untersucht werden, gibt Tab. 4.4 einen konzentrierten Überblick zu der schwachen Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems im Bereich kleiner Deformationen. Die Gestalt des Variationsprinzips für die Impulsbilanz (4.46) und des Variationsprinzips für die Wärmeleitungsgleichung (4.47) stimmen dabei mit den räumlichen Formulierungen (4.33) und (4.40) überein. Verständlicherweise impliziert ein Übergang von der geometrisch nichtlinearen zur kinematisch

Tabelle 4.3: Schwache Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems in der Referenzkonfiguration

Gesucht sind für jedes $t \in \mathbb{I}$ das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{X}, t) \in \mathcal{S}_{u,t}$ und das Temperaturfeld $\Theta(\vec{X}, t) \in \mathcal{S}_{\Theta,t}$, sodass die Variationsprinzipien

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathcal{R}} \ddot{\vec{u}} \cdot \delta \vec{u} \, dV + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} \, dV - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathcal{R}} \vec{k} \cdot \delta \vec{u} \, dV - \int_{\partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{t}_{\mathcal{R}} \cdot \delta \vec{u} \, dA = 0, \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathcal{R}} c_p \dot{\Theta} \delta \Theta \, dV + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \kappa_{\mathcal{R}} \text{Grad } \Theta \cdot \text{Grad } \delta \Theta \, dV = \\ - \int_{\partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}] \cup \partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}]} \vec{q}_{\mathcal{R}} \cdot \vec{n}_{\mathcal{R}} \delta \Theta \, dA + \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \varrho_{\mathcal{R}} p_{\Theta} \delta \Theta \, dV \end{aligned} \quad (4.39)$$

für beliebige $\delta \vec{u}(\vec{X}) \in \mathcal{V}_u$, $\delta \Theta(\vec{X}) \in \mathcal{V}_{\Theta}$, die Randbedingungen

$$\vec{u} = \bar{\vec{u}} \text{ auf } \partial_u \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad \Theta = \bar{\Theta} \text{ auf } \partial_{\Theta} \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.7, 4.8)$$

$$\vec{t}_{\mathcal{R}} = \mathbf{T}_{\mathcal{R}} \vec{n}_{\mathcal{R}} = \hat{f}_s \text{ auf } \partial_s \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad q_{\mathcal{R}} = -\vec{q}_{\mathcal{R}} \cdot \vec{n}_{\mathcal{R}} = \hat{f}_q \text{ auf } \partial_q \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.17, 4.18)$$

$$q_{\mathcal{R}} = -\vec{q}_{\mathcal{R}} \cdot \vec{n}_{\mathcal{R}} = \hat{f}_{\Theta q} \text{ auf } \partial_{\Theta q} \mathcal{R}[\mathcal{B}], \quad (4.19)$$

die Anfangsbedingungen in schwacher Form

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \delta \vec{u}(\vec{X}) \cdot \left(\vec{u}(\vec{X}, t_0) - \vec{u}_0(\vec{X}) \right) dV = 0, \quad (4.42)$$

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \delta \vec{u}(\vec{X}) \cdot \left(\vec{v}(\vec{X}, t_0) - \vec{v}_0(\vec{X}) \right) dV = 0, \quad (4.43)$$

$$\int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \delta \Theta(\vec{X}) \left(\Theta(\vec{X}, t_0) - \Theta_0(\vec{X}) \right) dV = 0 \quad (4.44)$$

sowie die konstitutiven und kinematischen Beziehungen

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\Phi}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q}), \quad \dot{\mathbf{q}} = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{E}, \Theta, \mathbf{q}), \quad \mathbf{q}(\vec{X}, t_0) = \mathbf{q}_0(\vec{X}), \quad (2.177, 2.178, 4.4)$$

$$c_p = \hat{c}_p(\Theta, J), \quad p_{\Theta} = \hat{p}_{\Theta}(\mathbf{E}, \dot{\mathbf{E}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), \quad \kappa_{\mathcal{R}} = \hat{\kappa}(\Theta) J \mathbf{C}^{-1}, \quad (2.183, 2.184, 2.181)$$

$$\mathbf{H} = \text{Grad } \vec{u}, \quad \mathbf{F} = \mathbf{1} + \mathbf{H}, \quad J = \det \mathbf{F}, \quad \mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}, \quad (2.26, 2.27, 2.29)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}), \quad \delta \mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \vec{u} + \text{Grad}^T \delta \vec{u} \mathbf{F}) \quad (2.34, 4.31)$$

erfüllt sind.

Tabelle 4.4: Schwache Form des thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems im Rahmen der geometrisch linearen Theorie (4.45)

Gesucht sind für jedes $t \in \mathbb{I}$ das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{x}, t) \in \hat{\mathcal{S}}_{u,t}$ und das Temperaturfeld $\Theta(\vec{x}, t) \in \hat{\mathcal{S}}_{\Theta,t}$, sodass die Variationsprinzipien

$$\int_{\Omega} \varrho \ddot{\vec{u}} \cdot \delta \vec{u} \, dV + \int_{\Omega} \mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{E}_L \, dV - \int_{\Omega} \varrho \vec{k} \cdot \delta \vec{u} \, dV - \int_{\Gamma_s} \vec{t} \cdot \delta \vec{u} \, dA = 0, \quad (4.46)$$

$$\int_{\Omega} \varrho c_p \dot{\Theta} \delta \Theta \, dV + \int_{\Omega} \kappa \operatorname{grad} \Theta \cdot \operatorname{grad} \delta \Theta \, dV = - \int_{\Gamma_q \cup \Gamma_{\Theta q}} \vec{q} \cdot \vec{n} \delta \Theta \, dA + \int_{\Omega} \varrho p_{\Theta} \delta \Theta \, dV \quad (4.47)$$

für beliebige $\delta \vec{u}(\vec{x}) \in \hat{\mathcal{V}}_u$, $\delta \Theta(\vec{x}) \in \hat{\mathcal{V}}_{\Theta}$, die Randbedingungen

$$\begin{aligned} \vec{u} &= \bar{\vec{u}} \quad \text{auf} \quad \Gamma_u, & \vec{t} &= \mathbf{T} \vec{n} = \vec{f}_s \quad \text{auf} \quad \Gamma_s, \\ \Theta &= \bar{\Theta} \quad \text{auf} \quad \Gamma_{\Theta}, & q &= -\vec{q} \cdot \vec{n} = f_q \quad \text{auf} \quad \Gamma_q, & q &= -\vec{q} \cdot \vec{n} = f_{\Theta q} \quad \text{auf} \quad \Gamma_{\Theta q}, \end{aligned}$$

die Anfangsbedingungen in schwacher Form

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta \vec{u}(\vec{x}) \cdot (\vec{u}(\vec{x}, t_0) - \vec{u}_0(\vec{x})) \, dV &= 0, & \int_{\Omega} \delta \vec{u}(\vec{x}) \cdot (\vec{v}(\vec{x}, t_0) - \vec{v}_0(\vec{x})) \, dV &= 0, \\ \int_{\Omega} \delta \Theta(\vec{x}) (\Theta(\vec{x}, t_0) - \Theta_0(\vec{x})) \, dV &= 0 \end{aligned}$$

sowie die konstitutiven und kinematischen Beziehungen

$$\mathbf{T} = \mathbf{h}(\mathbf{E}_L, \Theta, \mathbf{q}), \quad \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{r}(\mathbf{E}_L, \Theta, \mathbf{q}), \quad \mathbf{q}(\vec{x}, t_0) = \mathbf{q}_0(\vec{x}), \quad (2.185, 2.186)$$

$$c_p = \hat{c}_p(\Theta, \varepsilon_{Lv}), \quad p_{\Theta} = \hat{p}_{\Theta}(\mathbf{E}_L, \dot{\mathbf{E}}_L, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}), \quad (2.188)$$

$$\mathbf{E}_L = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \vec{u} + \operatorname{grad}^T \vec{u}), \quad \delta \mathbf{E}_L = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \delta \vec{u} + \operatorname{grad}^T \delta \vec{u}), \quad (2.135)$$

$$\varepsilon_{Lv} = \operatorname{tr} \mathbf{E}_L \quad (2.137)$$

erfüllt sind.

linearen Theorie auch eine Anpassung der Funktionsraumdefinitionen (4.23), (4.29), (4.35) und (4.36), weshalb in Tab. 4.4 nun die Gewichtungs- und Lösungsräume $\hat{\mathbf{V}}_u$, $\hat{\mathbf{V}}_\Theta$, $\hat{\mathbf{S}}_{u,t}$, $\hat{\mathbf{S}}_{\Theta,t}$ Anwendung finden.

4.3 Starke Form von Anfangs-Randwertproblemen mit Kontakt

Mit den Grundgleichungen der nichtlinearen Kontinuumsmechanik aus Kapitel 2 und der Formulierung der Kontaktbedingungen in Kapitel 3 soll das mechanische Anfangs-Randwertproblemen für die Behandlung von unilateralen Kontakt bei großen Deformationen in eine Gleichungsstruktur gekleidet werden, siehe Tab. 4.5. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf der Darstellung des rein mechanischen, strukturdynamischen Systems unter Ausschluss jeglicher thermischer Effekte. Die Kontaktzwänge in normaler Richtung sind üblicherweise in Form der KKT-Bedingungen (3.23) definiert, während die tangentialen Schlupfbewegung durch das Coulombsche Reibgesetz (3.25) modelliert wird. Unabhängig vom verwendeten Oberflächen-Konstitutivmodell bedingt Reibung eine wesentliche Unstetigkeit und Einschränkung der Regularität. Aus diesem Grund liegt der Schwerpunkt in der vorliegenden Arbeit auf der Behandlung von reibungslosen Kontaktproblemen. Mit Blick auf die Gebietsdiskretisierung der Kontaktoberflächen mit Hilfe der Mortar-Methode, siehe Abschnitt 5.5, ist es zweckdienlich die Kontaktbedingungen mit Größen in der Momentankonfiguration auszudrücken. Eine Darstellung der mit finiten Deformationsprozessen einhergehenden Kontaktproblematik in Bezug auf die Referenzkonfiguration ist in [Laursen, 2003; Wriggers, 2006; Hartmann, 2007] zu finden.

4.4 Variationsformulierungen von Anfangs-Randwertproblemen mit Kontakt

4.4.1 Schwache Form der Impulsbilanz mit Kontakt

Zur Ableitung der schwachen Form der Impulsbilanz unter Einbindung des Kontakts wird das Prinzip von D'Alembert um die virtuelle Kontaktarbeit $\delta\pi_c$ erweitert. Unter Ausblendung der Temperaturabhängigkeit gilt

$$\begin{aligned}\delta\pi_u^{\text{LM}}(t, \vec{u}, \ddot{\vec{u}}, \mathbf{q}, \delta\vec{u}) &= \sum_{i=1}^2 \delta\pi_u^{(i)}(t, \vec{u}^{(i)}, \ddot{\vec{u}}^{(i)}, \mathbf{q}^{(i)}, \delta\vec{u}^{(i)}) + \delta\pi_c(\vec{u}, \delta\vec{u}) \\ &= \sum_{i=1}^2 \left(\delta\pi_{\text{kin}}^{(i)} + \delta\pi_{\text{int}}^{(i)} - \delta\pi_{\text{ext}}^{(i)} \right) + \delta\pi_c = 0.\end{aligned}\tag{4.48}$$

Im Folgenden soll der Fokus auf der Darstellung der virtuellen Kontaktarbeit liegen, welche aus den Oberflächenspannungen $\vec{t}_c^{(i)}$ in der Kontaktregion $\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(i)}]$ resultieren. Aus Gründen einer effizienten FEM-Programmimplementierung wird $\delta\pi_c$ in der Momentankonfiguration angegeben. Die gesamte virtuelle Arbeit für die Kontaktinteraktionen

Tabelle 4.5: Starke Form des rein mechanischen unilateralen Kontaktproblems mit und ohne Reibung

Gesucht ist das Verschiebungsfeld $\vec{u}^{(i)}$, $i = 1, 2$, sodass

$\varrho_{\text{R}}^{(i)} \ddot{\vec{u}}^{(i)} = \text{Div } \mathbf{T}_{\text{R}}^{(i)} + \varrho_{\text{R}}^{(i)} \vec{k}^{(i)}$

auf $\mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}] \times \mathbb{I}$, (2.78)

$\dot{\mathbf{q}}^{(i)} = \tilde{\mathbf{r}}^{(i)} (\mathbf{E}^{(i)}, \mathbf{q}^{(i)})$

auf $\mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}] \times \mathbb{I}$, (2.178)

die Anfangsbedingungen,

$\vec{u}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t_0) = \vec{u}_0^{(i)}(\vec{X}^{(i)}), \dot{\vec{v}}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t_0) = \vec{v}_0^{(i)}(\vec{X}^{(i)})$

$\forall \vec{X}^{(i)} \in \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$, (4.1, 4.2)

$\mathbf{q}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t_0) = \mathbf{q}_0^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t_0)$

$\forall \vec{X}^{(i)} \in \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}]$, (4.4)

die Randbedingungen,

$\vec{u}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t) = \bar{\vec{u}}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t)$

auf $\partial_{\text{u}} \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}] \times \mathbb{I}$, (4.7)

$\vec{t}_{\text{R}}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t) = \mathbf{T}_{\text{R}}^{(i)} \vec{n}_{\text{R}}^{(i)} = \hat{\vec{f}}_s^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t)$

auf $\partial_{\text{s}} \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(i)}] \times \mathbb{I}$, (4.17)

die in der Momentankonfiguration formulierten Normalkontaktbedingungen,

$g \geq 0, \quad p_{\text{N}} \leq 0, \quad p_{\text{N}} g = 0$

auf $\partial_{\text{c}} \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(1)}] \times \mathbb{I}$, (3.23)

die Tangentialkontaktbedingungen für reibungsbehafteten Kontakt

$f_{\tau} = \|\vec{t}_{\tau}\| - \mu_{\text{c}} |p_{\text{N}}| \leq 0, \quad \gamma_{\tau} \geq 0, \quad \gamma_{\tau} f_{\tau} = 0,$

auf $\partial_{\text{c}} \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(1)}] \times \mathbb{I}$, (3.25)

$\vec{v}_{\tau} + \gamma_{\tau} \frac{\vec{t}_{\tau}}{\|\vec{t}_{\tau}\|} = \vec{0},$

bzw. die Tangentialkontaktbedingungen für reibungslosen Kontakt

$\vec{t}_{\tau} = \vec{0}$

auf $\partial_{\text{c}} \mathcal{X}_t [\mathcal{B}^{(1)}] \times \mathbb{I}$, (3.24)

und die zugehörigen konstitutiven Beziehungen

$\tilde{\mathbf{T}}^{(i)} = \tilde{\Phi}^{(i)} (\mathbf{E}^{(i)}, \mathbf{q}^{(i)}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{T}_{\text{R}}^{(i)} = \mathbf{F}^{(i)} \tilde{\mathbf{T}}^{(i)}$

(2.177, 2.53)

erfüllt sind.

zwischen zwei deformierbaren materiellen Körpern $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$ ist definiert als

$$\delta\pi_c = - \sum_{i=1}^2 \int_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(i)}]} \vec{t}_c^{(i)} \cdot \delta \vec{u}^{(i)} da. \quad (4.49)$$

Unter Berücksichtigung der Impulsbilanz in der Kontaktschnittstelle (3.22) und der Parametrisierungsvorschrift (3.9) gelingt es die beiden Summanden in Gl. (4.49) als ein Oberflächenintegral

$$\delta\pi_c = - \int_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} \vec{t}_c^{(1)}(\vec{x}^{(1)}, t) \cdot (\delta \vec{u}^{(1)}(\vec{x}^{(1)}) - \delta \vec{u}^{(2)}(\vec{\chi}_{\gamma_c}(\vec{x}^{(1)}, t))) da \quad (4.50)$$

über die Slavefläche zu formulieren. Darüber hinaus impliziert die Transformationsabbildung $\vec{\chi}_{\gamma_c}$ einen Wechsel der Variablen für das virtuelle Verschiebungsfeld $\delta \vec{u}^{(2)}(\hat{\vec{x}}^{(2)})$ auf $\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(2)}]$.

Hierauf folgend werden die slave-seitigen Kontaktspannungen $\vec{t}_c^{(1)}$ durch einen adäquaten Ausdruck hinsichtlich einer in Abschnitt 4.5 angegebenen Regularisierungsstrategie ersetzt. Zur Erzwingung der Kontaktbedingungen kommt die Lagrange-Multiplikator-Methode zum Einsatz, welche auf die Lösung eines Sattelpunktproblems führt. Mit Hilfe des als zusätzliche Lösungsvariable eingeführten Lagrange-Multiplikatorfeldes $\vec{\lambda}$ werden nun die negativen Kontaktspannungen auf der Slave-Seite substituiert:

$$\vec{\lambda} = -\vec{t}_c^{(1)} \quad (4.51)$$

Der Lagrange-Multiplikator $\vec{\lambda}$ liefert daher die Interpretation einer Flächenlast zur Erzeugung einer slave-seitigen Deformation. Der Lösungsraum der Lagrange-Multiplikatoren $\vec{\lambda} \in \mathcal{M}_{\lambda}$ wird so definiert, dass dieser direkt die Kontaktbedingungen, siehe nachfolgenden Abschnitt 4.4.2, in schwacher Integralform erzwingt.¹⁷ Für weitere Details zu der mathematisch anspruchsvollen Konkretisierung von \mathcal{M}_{λ} aus dem Bereich der Funktionalanalysis sei auf [Wohlmuth, 2001; Hieber und Wohlmuth, 2005; Hieber et al., 2007; Hager et al., 2008; Hieber, 2008; Wohlmuth, 2011; Popp, 2012; Gitterle, 2012] referiert.

Die virtuelle Kontaktarbeit des gemischten Variationsproblems, vgl. mit Gl. (4.50), nimmt daraufhin die Gestalt

$$\delta\pi_c = \int_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} \vec{\lambda}(\vec{x}^{(1)}, t) \cdot (\delta \vec{u}^{(1)}(\vec{x}^{(1)}) - \delta \vec{u}^{(2)}(\vec{\chi}_{\gamma_c}(\vec{x}^{(1)}, t))) da \quad (4.52)$$

an. Es sei angemerkt, dass eine Aufspaltung der virtuellen Kontaktarbeit in Gl. (4.52) in einen normalen und tangentialen Anteil nicht erforderlich ist. Solch eine Unterteilung ist beispielsweise für einen Penalty- oder einen Augmented-Lagrange-Ansatz notwendig, siehe hierzu Abschnitt 4.5.

¹⁷Die Definition des Lagrange-Multiplikatorraums richtet sich auch nach der eingesetzten Klasse. So sind Standard-Lagrange-Multiplikatoren einem anderen Funktionsraum als die in der vorliegenden Arbeit behandelten Dualen-Lagrange-Multiplikatoren zuzuordnen.

4.4.2 Schwache Form der Kontaktbedingungen

Innerhalb einer kontinuumsmechanischen Betrachtung ist die in Kapitel 3 vorgestellte KKT-Darstellung der Kontaktbedingungen nicht die einzige Möglichkeit. Mit Bezug auf eine schwache Formulierung der Kontaktbedingungen werden Gl. (3.23) und Gl. (3.25) als Variationsungleichungen ausgedrückt, siehe hierzu [Hüeber, 2008; Gitterle, 2012]. Unter Verwendung der Lagrange-Multiplikatoren $\vec{\lambda} \in \mathcal{M}$ und der Einführung zusätzlicher Variationen $\delta\vec{\lambda} \in \mathcal{M}^{18}$ sowie einer Zerlegung dieser Größen in einen Normalanteil

$$\lambda_N = \vec{\lambda} \cdot \vec{n}, \quad \delta\lambda_N = \delta\vec{\lambda} \cdot \vec{n} \quad (4.53)$$

und tangentialen Anteil

$$\vec{\lambda}_\tau = \vec{\lambda} - \lambda_N \vec{n} = (\mathbf{1} - \vec{n} \otimes \vec{n}) \vec{\lambda}, \quad \delta\vec{\lambda}_\tau = \delta\vec{\lambda} - \delta\lambda_N \vec{n} = (\mathbf{1} - \vec{n} \otimes \vec{n}) \delta\vec{\lambda}, \quad (4.54)$$

lassen sich die starken, auf dem Rand $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ definierten Normalkontaktbedingungen (3.23) in die Gestalt

$$g(\delta\lambda_N - \lambda_N) \geq 0 \quad \forall \lambda_N \in \mathbb{R}_0^+ \wedge \delta\lambda_N \in \mathbb{R}_0^+ \quad (4.55)$$

umwandeln. Die starke Form des tangentialen Reibgesetzes nach Coulomb, vgl. Gl. (3.25), kann über die Variationsungleichung

$$\vec{v}_\tau \cdot (\delta\vec{\lambda}_\tau - \vec{\lambda}_\tau) \leq 0 \quad \forall \vec{\lambda}_\tau \in \mathcal{B}(\mu_c \lambda_N) \wedge \delta\vec{\lambda}_\tau \in \mathcal{B}(\mu_c \lambda_N) \quad (4.56)$$

nachgebildet werden, wobei $\mathcal{B}(\mu_c \lambda_N)$ einen durch die Tangentialvektoren $\vec{\tau}_\xi$ und $\vec{\tau}_\eta$ aufgespannten Untervektorraum kennzeichnet, in dem ausgehend vom Ursprung, alle Vektoren $\vec{\mu}_\tau \in \mathcal{B}(\mu_c \lambda_N)$ in einem Kreis mit dem Radius $\mu_c \lambda_N$ liegen. Der Nachweis der Äquivalenz zwischen den als Variationsungleichungen (4.55) und (4.56) formulierten Kontaktbedingungen und deren Gegenstücke (3.23) und (3.25) ist [Hüeber, 2008; Gitterle, 2012] zu entnehmen.

Aus der Integration der Aussagen (4.55) und (4.56) über die slave-seitige Kontaktfläche in der Momentankonfiguration resultieren die schwachen Formulierungen für die normalen und tangentialen Kontaktbedingungen:

$$\delta\pi_N = \int_{\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]} g(\delta\lambda_N - \lambda_N) da \geq 0 \quad \forall \delta\vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda, \quad (4.57)$$

$$\delta\pi_\tau = \int_{\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]} \vec{v}_\tau \cdot (\delta\vec{\lambda}_\tau - \vec{\lambda}_\tau) da \leq 0 \quad \forall \delta\vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda \quad (4.58)$$

Neben der dualen Variable $\vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda$ stammt nun auch die Variation $\delta\vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda$ aus dem zulässigen Satz von Funktionen \mathcal{M}_λ . Der konvexe Unterraum $\mathcal{M}_\lambda \subset \mathcal{M}$ enthält die an

¹⁸Innerhalb einer punktwisen kontinuumsmechanischen Betrachtung sind die Feldgrößen $\vec{\lambda}$ und $\delta\vec{\lambda}$ im Funktionsraum \mathcal{M} definiert. Die Basis zur Konstruktion von \mathcal{M} bilden je nach eingesetztem Lagrange-Multiplikatorentyp unterschiedliche Spurräume, siehe [Wohlmuth, 2001].

$\vec{\lambda}$ und $\delta\vec{\lambda}$ gestellten Restriktionen, siehe Gleichungen (4.55) und (4.56), in schwacher, integraler Form.¹⁹ In der schwach formulierten Kontaktbedingung (4.57) ist neben der Bestimmung der Verschiebungs- und Kontaktspannungslösung auch die Suche nach der augenblicklichen aktiven Kontaktzone $\partial_a\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}] = \partial_a\chi_t[\mathcal{B}^{(2)}]$, mit $\partial_a\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}] \subset \partial_c\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]$, implizit eingebettet. Um dies zu zeigen, wird Gl. (4.57) durch die zulässige Wahl der Variation $\delta\lambda_N = 0 \in \mathbb{R}_0^+$ in Gl. (4.59)₁ überführt sowie durch Wahl von $\delta\lambda_N = 2\lambda_N \in \mathbb{R}_0^+$ in den Ausdruck (4.59)₂ umgeschrieben. Es gilt:

$$\int_{\partial_c\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} g \lambda_N da \leq 0, \quad \int_{\partial_c\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} g \lambda_N da \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \int_{\partial_c\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} g \lambda_N da = 0 \quad (4.59)$$

Die Kombination der beiden Ausdrücke (4.59)₁ und (4.59)₂ liefert dann die Äquivalenzaussage (4.59)₃. Unter Berücksichtigung der im integralen Sinne im Lösungsraum \mathcal{M}_λ eingearbeiteten Kontaktspannungsrandbedingung $\lambda_N \geq 0$ bzw. $\lambda_N \in \mathbb{R}_0^+$ beschreibt Gl. (4.59)₃ die aktive Kontaktzone auf der $\lambda_N > 0$ und $g = 0$ gelten. Die Detektion des inaktiven Kontaktgebiets $\partial_i\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}] = \partial_c\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}] \setminus \partial_a\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]$ folgt aus der Erfüllung von Gl. (4.59)₃, mit $\lambda_N = 0$. Der Nachweis für $g > 0$ auf $\partial_i\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]$ wird durch die Wahl von $\delta\lambda_N = \lambda_N + \mu_N \in \mathbb{R}_0^+$ in Gl. (4.57), mit $\mu_N \in \mathbb{R}_0^+$, erbracht. Dies führt auf das Resultat

$$\int_{\partial_c\chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} g \mu_N da \geq 0 \quad \forall \mu_N \in \mathbb{R}_0^+ \quad \Rightarrow \quad g \geq 0. \quad (4.60)$$

Analog hierzu stellt die variationell formulierte Kontaktbedingung (4.58) inhärent eine Aufteilung der aktiven Kontaktzone in ein haftendes und gleitendes Teilgebiet bereit. Für einen entsprechenden Nachweis sei auf [Hüeber, 2008; Gitterle, 2012] referiert. Gemäß [Popp, 2012] können die Gleichungen (4.57) und (4.58) auch in einem einzigen Variationsausdruck als

$$\delta\pi_\lambda = \delta\pi_N - \delta\pi_\tau \geq 0 \quad (4.61)$$

zusammengefasst werden.

4.4.3 Schwache Form von Anfangs-Randwertproblemen mit Kontakt

In den Abschnitten 4.4.1 und 4.4.2 wurden die schwachen Formulierungen für die Impulsbilanz, die Nichtdurchdringungsbedingung und das Coulombsche Reibgesetz vorgestellt. Infolge der durch die Kontaktnebenbedingungen implizierten Einschränkungen an den Lösungsraum der resultierenden schwachen Form des Anfangs-Randwertproblems sind bekannte Regularisierungsstrategien aus der nichtlinearen Optimierung zur Behandlung dieser Kopplungsbedingungen anzuwenden. Die Erzwingung dieser restriktiven Optimalitätskriterien mit der in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden Lagrange-Multiplikator-Methode führt auf eine gemischte Variationsformulierung in Abhängigkeit

¹⁹Vereinfacht dargestellt, entspricht der Funktionsraum \mathcal{M}_λ dem schwachen Analog zum Unterraum $\mathbb{R}_0^+ \cap \mathcal{B}(\mu_c \lambda_N)$.

des Verschiebungs- und des Lagrange-Multiplikatorfeldes. Tabelle 4.6 fasst die schwache Form des unilateralen Kontaktproblems zusammen. Neben den reibungsbehafteten Schlupfbedingungen liegt der Fokus der vorliegenden Arbeit primär auf der Behandlung von reibungsfreien Kontakt. Das Ausblenden der tangentialen Kontaktbedingung (3.24) für den Fall des reibungsfreien Gleitens impliziert eine Anpassung des zulässigen Satz von Funktionen \mathcal{M}_λ für den Lagrange-Multiplikator, siehe [Popp, 2012]. Unter Beachtung dieser Modifikation bleibt die schwache Form der Impulsbilanz aus Gl. (4.48) unverändert und lediglich Gl. (4.61) reduziert sich auf die variationelle Aussage

$$\delta\pi_\lambda = \delta\pi_N = \int_{\partial_c \mathcal{X}_t[\mathcal{B}^{(1)}]} g(\delta\lambda_N - \lambda_N) da \geq 0 \quad \forall \delta\vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda. \quad (4.62)$$

Streng genommen würde also ein skalarer Lagrange-Multiplikator λ_N zur Erzwingung der Nichtdurchdringungsbedingung ausreichen. Mit Blick jedoch auf den allgemeineren Fall des unilateralen reibungsbehafteten Kontakts kommt auch für das zuletzt genannte Szenario ein vektorwertiger Lagrange-Multiplikator zum Einsatz.

Wie in Abschnitt 4.2.1 gezeigt, können die Standardausdrücke für die kinetische, innere und externe virtuelle Arbeit sowohl in der Referenz- als auch in Bezug auf die Momentankonfiguration dargestellt werden. Ohne Gewähr auf Vollständigkeit haben zahlreiche Autoren wie [Puso und Laursen, 2003; Puso, 2004; Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Fischer und Wriggers, 2005; Yang et al., 2005; Popp et al., 2010; Popp, 2012; Gitterle, 2012; Farah et al., 2015] gezeigt, dass im Rahmen einer mortar-basierten Finite-Elemente-Methode eine Formulierung der virtuellen Kontaktarbeit $\delta\pi_c$ und der Kontaktbedingungen $\delta\pi_\lambda$ in der Momentankonfiguration zweckdienlicher ist. Ein Grund für diesen Sachverhalt repräsentiert die Notwendigkeit für die diskrete Umsetzung der Transformationsabbildung $\vec{\chi}_{\gamma_c}$ in der aktuellen Konfiguration, siehe Abschnitt 5.5. Zum anderen können die slave-seitigen Lagrange-Multiplikatoren direkt als Kontaktspannungen interpretiert und umständliche Push-Forward-Operationen vermieden werden.

4.5 Lösungsverfahren für Kontaktprobleme

Um die in dieser Arbeit verwendete Kontaktformulierung besser einordnen zu können, werden im folgenden Abschnitt neben der bereits in den vorhergehenden Abschnitten 4.4.1 und 4.4.2 in die Variationsgleichungen (4.52), (4.57) und (4.58) eingeflossenen Lagrange-Multiplikator-Methode weitere Strategien zur Regularisierung der Kontaktnebenbedingungen anhand eines einfachen eindimensionalen Beispiels vorgestellt. Dabei soll der Fokus der Darstellung für die aus der Optimierungsliteratur bekannten Methoden auf einer reinen Potentialformulierung liegen. Da diese Vorgehensweise die Existenz einer Potentialfunktion voraussetzt, bleiben jegliche dissipative Prozesse, die beispielsweise mit reibungsbehaftetem Kontakt oder inelastischem Materialverhalten einhergehen, unberücksichtigt. Die Regularisierungsstrategien werden infolgedessen nur zur Erzwingung der Normalkontaktbedingungen herangezogen. Soll eine Pfadabhängigkeit in die Berechnungen einfließen, ist es nicht möglich von einem zugrunde liegenden Potential zu starten. Hierzu müssen die Methoden zur Erzwingung der Kopplungsbedingungen

Tabelle 4.6: Schwache Form des unilateralen reibungsbehafteten bzw. reibungslosen Kontaktproblems

Gesucht sind für jedes $t \in \mathbb{I}$ das Verschiebungsfeld $\vec{u}^{(i)} \in \mathcal{S}_{u,t}^{(i)}$, $i = 1, 2$, und das Lagrange-Multiplikatorfeld $\vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda$, sodass die schwache Form der Impulsbilanz

$$\sum_{i=1}^2 \left(\delta \pi_{\text{kin}}^{(i)}(\ddot{\vec{u}}^{(i)}, \delta \vec{u}^{(i)}) + \delta \pi_{\text{int}}^{(i)}(t, \vec{u}^{(i)}, \mathbf{q}^{(i)}, \delta \vec{u}^{(i)}) - \delta \pi_{\text{ext}}^{(i)}(t, \vec{u}^{(i)}, \delta \vec{u}^{(i)}) \right) - \delta \pi_c(t, \vec{u}, \vec{\lambda}, \delta \vec{u}) = 0, \quad \forall \delta \vec{u}^{(i)} \in \mathcal{V}_u^{(i)}, \quad (4.48)$$

$$\text{mit} \quad -\delta \pi_c = \int_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} \vec{\lambda} \cdot (\delta \vec{u}^{(1)} - \delta \vec{u}^{(2)}) \, da, \quad (4.52)$$

die schwache Form der Kontaktbedingungen für den reibungsbehafteten Fall

$$\int_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} g(\delta \lambda_N - \lambda_N) \, da - \int_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} \vec{v}_\tau \cdot (\delta \vec{\lambda}_\tau - \vec{\lambda}_\tau) \, da \geq 0, \quad \forall \delta \vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda, \quad (4.57, 4.58)$$

bzw. die schwache Form der Kontaktbedingungen für den reibungslosen Fall

$$\int_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} g(\delta \lambda_N - \lambda_N) \, da \geq 0, \quad \forall \delta \vec{\lambda} \in \mathcal{M}_\lambda, \quad (4.62)$$

die Randbedingungen

$$\vec{u}^{(i)} = \vec{\bar{u}}^{(i)} \text{ auf } \partial_u \chi_t[\mathcal{B}^{(i)}], \quad \vec{t}^{(i)} = \mathbf{T}^{(i)} \vec{n}^{(i)} = \vec{f}_s^{(i)} \text{ auf } \partial_s \chi_t[\mathcal{B}^{(i)}],$$

die Anfangsbedingungen in schwacher Form

$$\int_{\mathcal{K}[\mathcal{B}^{(i)}]} \delta \vec{u}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}) \cdot \left(\vec{u}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t_0) - \vec{u}_0^{(i)}(\vec{X}^{(i)}) \right) \, dV = 0, \quad (4.42)$$

$$\int_{\mathcal{K}[\mathcal{B}^{(i)}]} \delta \vec{u}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}) \cdot \left(\vec{v}^{(i)}(\vec{X}^{(i)}, t_0) - \vec{v}_0^{(i)}(\vec{X}^{(i)}) \right) \, dV = 0, \quad (4.43)$$

sowie die konstitutiven Beziehungen

$$\vec{\mathbf{T}}^{(i)} = \vec{\Phi}^{(i)}(\mathbf{E}^{(i)}, \mathbf{q}^{(i)}), \quad (2.177)$$

$$\dot{\mathbf{q}}^{(i)} = \vec{\mathbf{r}}^{(i)}(\mathbf{E}^{(i)}, \mathbf{q}^{(i)}), \quad \mathbf{q}^{(i)}(\vec{X}, t_0) = \mathbf{q}_0(\vec{X}) \quad (2.178)$$

erfüllt sind.

direkt auf das Variationsproblem angewendet werden. Zum Zweck einer vereinfachten Darstellung gilt außerdem die Annahme, dass das aktive Kontaktgebiet bzw. die Ausdehnung der Kontaktzone bekannt ist. Diese Vereinfachung überführt, die durch die KKT-Bedingungen (3.23) ergänzte, reibungsfreie Kontaktproblematik auf ein gleichheitsrestringiertes Optimierungsproblem. Die Anbindung entsprechender Algorithmen zur Unterscheidung zwischen aktiven und inaktiven Kontaktbereichen, siehe Abschnitt 5.5.5, an die in den Abschnitten 4.5.1 bis 4.5.5 behandelten Lösungsverfahren entfällt hierdurch.

Um eine anschauliche Charakterisierung der unterschiedlichen Formulierungen zu realisieren, soll das in Abb. 4.2 visualisierte Kontaktproblem, bestehend aus einer Feder mit der Federsteifigkeit c und einem daran befestigten Massenpunkt m , betrachtet werden. Die infolge der wirkenden Gravitationsbeschleunigung a_g verursachte Auslenkung der

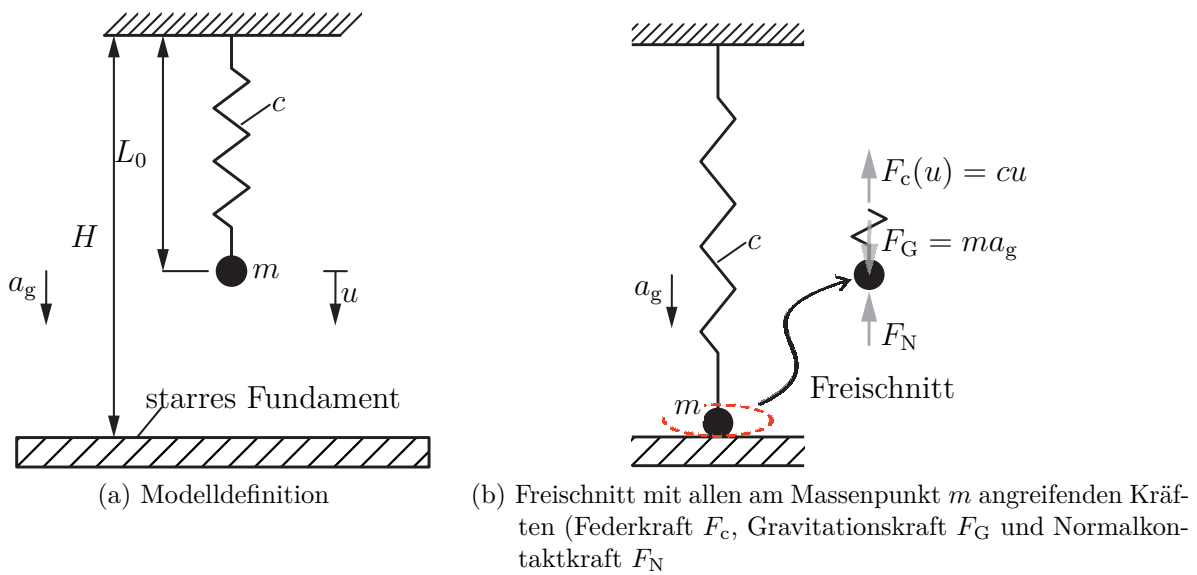


Abbildung 4.2: Illustration des Kontaktproblems zwischen einem linear-elastischen Feder-Masse-System und einem starren Fundament (Signorini-Kontaktproblem) sowie Wahl eines Modellparametersatzes $\{c, m, a_g, H, L_0\}$

Masse m wird durch einen starren Untergrund behindert. Dabei ist das linear-elastische Federelement mit der undeformierten Federlänge L_0 ausgehend vom Untergrund im Abstand H fixiert. Der Einfluss der Massenträgheit bleibt unberücksichtigt, da sie zur Demonstration der folgenden Regularisierungsstrategien nicht von Bedeutung ist. Dieses auf die wesentlichen mechanischen Komponenten reduzierte Einfreiheitsgradsystem zur Beschreibung eines reibungsfreien Kontaktproblems wird gleichermaßen in [Wriggers, 2006; Konyukhov und Izi, 2015] als Einführungsbeispiel in die numerische Kontaktmechanik gewählt.

Die Ausgangsbasis für die Behandlung der restringierten Bewegung des Feder-Masse-

Systems bildet das Funktional des Gesamtpotentials (potentielle Energie)

$$\pi_u(u) = \frac{1}{2}cu^2 - ma_g u. \quad (4.63)$$

Konform hierzu sind die Federkraft $F_c(u)$ und die konservative Gewichtskraft F_G definiert als $F_c(u) = cu$ und $F_G = ma_g$, mit der Erdbeschleunigung a_g . Die Nichtdurchdringungsbedingung, siehe Gl. (3.23)₁, sei durch die geometrische Ungleichung

$$g(u) := H - L_0 - u \geq 0 \quad (4.64)$$

gegeben. Damit nimmt das durch die Kollision des Feder-Masse-Systems mit dem starren Hindernis zu lösende Optimierungsproblem die in Tab. 4.7 spezifizierte Gestalt an. Als

Tabelle 4.7: Optimierungsproblem unter der Nebenbedingung der geometrischen Nichtdurchdringung zur Behandlung der in Abb. 4.2 gezeigten Kontaktproblematik

Bestimme die Verschiebung u , sodass die folgenden Bedingungen	
• Prinzip vom Minimum des Gesamtpotentials	
$\pi_u(u) \rightarrow \min \Rightarrow \delta\pi_u(u, \delta u) = D_u \pi_u(u) [\delta u] = \delta u(cu - ma_g) = 0$	(4.65)
• geometrische Nichtdurchdringungsbedingung	
$g(u) := H - L_0 - u \geq 0$	(4.64)
erfüllt werden.	

Einschränkung ist hinzuzufügen, dass jedoch eine aktive Kontaktinteraktion nur für

$$\frac{ma_g}{c} \geq H - L_0 \quad (4.66)$$

auftritt, weshalb diese Annahme für die folgenden Betrachtungen eingehalten werden muss. Berührt der Massenpunkt die starre Platte wird eine entsprechend Abb. 4.2b eingezeichnete Reaktionskraft F_N vom Untergrund auf die Punktmasse übertragen. Da Adhäsionseffekte in der Kontaktschnittstelle ausgeschlossen werden, entspricht die unbekannte Reaktionskraft, deren Bestimmung mit den nachfolgenden Lösungsmethoden gelingt, einer Druckkraft, d. h. $F_N \geq 0$. Darüber hinaus lässt das eindimensionale System aus Abb. 4.2 lediglich die Behandlung eines Punktkontaktes zu, wodurch das aktive Kontaktgebiet a priori bekannt ist. Wie eingangs dieses Abschnitts angemerkt, kann infolgedessen die Problemformulierung aus Tab. 4.7 in das in Tab. 4.8 zusammengefasste gleichheitsrestringierte Optimierungsproblem überführt werden. Zur Lösung der Optimierungsaufgabe aus Tab. 4.8 kommen nun die in den Abschnitten 4.5.1 bis 4.5.5 diskutierten Methoden zum Einsatz, wobei sich in der Praxis im Wesentlichen zwei Verfahren, die Lagrange-Multiplikator- und die Penalty-Methode, etabliert haben. Kombinationen aus beiden Varianten werden beispielsweise in der sogenannten Augmented-

Tabelle 4.8: Optimierungsproblem unter der Gleichheitsnebenbedingung $g = 0$ zur Erzwingung des Kontaktfalls zwischen dem in Abb. 4.2 visualisierten Einfreiheitsgradsystem und dem starren Untergrund

Bestimme die Verschiebung u , sodass die folgenden Bedingungen	
• Prinzip vom Minimum des Gesamtpotentials	
$\pi_u(u) \rightarrow \min \Rightarrow \delta\pi_u(u, \delta u) = D_u \pi_u(u) [\delta u] = \delta u(cu - ma_g) = 0$	(4.67)
• Erzwingung der aktiven geometrischen Nichtdurchdringung im Kontaktfall	
$g(u) := H - L_0 - u = 0$	(4.68)
erfüllt werden.	

Lagrange-Methode, siehe Abschnitt 4.5.3, realisiert. Auch seltener anzutreffende Methoden zur Erzwingung von Nebenbedingungen, wie die Perturbed-Lagrange-Methode und die Nitsche-Methode, sollen in den Abschnitten 4.5.4 und 4.5.5 kurz Erwähnung finden. Die aufgezählten Regularisierungsstrategien lassen sich auf Basis einer allgemeinen Potentialformulierung der Gestalt

$$\pi = \pi_u + \pi_c \quad (4.69)$$

motivieren und führen zur Berücksichtigung der Gleichheitsnebenbedingung (4.68) ein zusätzliches Funktional π_c ein. Die Konstruktion von π_c ist dabei vom angewendeten Optimierungsalgorithmus abhängig. Aus der Forderung der Stationarität von π , d. h. $\delta\pi = 0$, folgt die Lösung des Optimierungsproblems aus Tab. 4.8.

4.5.1 Lagrange-Multiplikator-Methode

Die Lagrange-Multiplikator-Methode basiert auf der Konstruktion des Lagrange-Funktional

$$\pi^{\text{LM}}(u, \lambda) = \pi_u(u) + \pi_c^{\text{LM}}(u, \lambda), \quad \text{mit} \quad \pi_c^{\text{LM}}(u, \lambda) = -\lambda g(u). \quad (4.70)$$

In Bezug auf das vorbezeichnete Feder-Masse-System, siehe Abb. 4.2, wird die geometrische Gleichheitsnebenbedingung (4.68) mit Hilfe eines skalarwertigen Lagrange-Multiplikators λ zum Prinzip vom Minimum des Gesamtpotentials hinzugefügt. Neben der Verschiebungsfunktion u ist damit das Potential (4.70) von dem Lagrange-Multiplikator λ als weiteres unbekanntes Funktionsargument abhängig. Durch Bilden der ersten Variation von Gl. (4.70) nach den Variablen u und λ folgt die schwache Form

$$\begin{aligned} \delta\pi^{\text{LM}}(u, \delta u, \lambda, \delta\lambda) &= \delta\pi_u(u, \delta u) + \delta\pi_c^{\text{LM}}(u, \delta u, \lambda, \delta\lambda) \\ &= \delta u(cu - ma_g) - \lambda\delta g - \delta\lambda g(u) = 0. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Infolge der Unabhängigkeit von δu und $\delta\lambda$ sowie unter Berücksichtigung von Gl. (4.68) und der Variation $\delta g = -\delta u$ resultiert das aus zwei skalaren Gleichungen bestehende

lineare Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} c & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} ma_g \\ H - L_0 \end{Bmatrix}. \quad (4.72)$$

Die erste Zeile in Gl. (4.72) repräsentiert für den Fall der Kollision mit dem starren Hindernis das an der Punktmasse aufgestellte Kräftegleichgewicht, siehe Abb. 4.2b. Es ist offensichtlich, dass der Lagrange-Multiplikator λ als eine vom Untergrund auf die Punktmasse übertragene Reaktionskraft identifiziert werden kann, d. h. es gilt $\lambda := F_N$. Gemäß der in der vorliegenden Arbeit im Rahmen einer vektoriell formulierten Lagrange-Multiplikator-Methode verfolgten Sichtweise kann jedoch alternativ λ auch als eine auf das starre Fundament wirkende Belastung interpretiert werden. Die zweite Zeile in dem linearen Gleichungssystem (4.72) stellt dagegen die exakte Erfüllung der geometrischen Nichtdurchdringungsbedingung bei Berührung fest, die die zulässige Verschiebungslösung

$$\hat{u} := u = H - L_0 \quad (4.73)$$

impliziert. Hieraus ergibt sich unmittelbar durch Rücksubstitution der kinematisch zulässigen Lösung \hat{u} in das Kräftegleichgewicht (erste Zeile des linearen Gleichungssystems (4.72)) der Wert des Lagrange-Multiplikator zu

$$\hat{\lambda} := \lambda = ma_g - c(H - L_0). \quad (4.74)$$

Zur grafischen Veranschaulichung ist in Abb. 4.3 für das betrachtete Einfreiheitsgradsystem die Lagrange-Funktion $\pi^{\text{LM}}(u, \lambda)$ in Abhängigkeit von $u \in \mathbb{R}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ dargestellt. Der Schnittpunkt zwischen der aus der Konvexität des Energiefunktionals $\pi^{\text{LM}}(u, \lambda)$ hinsichtlich u resultierenden Parabel

$$\hat{\pi}^{\text{LM}}(u) = \pi^{\text{LM}}(u, \hat{\lambda}) = 1/2c(u - (H - L_0))^2 + (1/2c(H - L_0) - ma_g)(H - L_0)$$

für $u \in \mathbb{R}$ und der wegen der Erzwingung von $g(\hat{u}) = 0$ konstanten Linie $\tilde{\pi}^{\text{LM}}(\lambda) = \pi^{\text{LM}}(\hat{u}, \lambda) = \pi_u(\hat{u}) - \lambda g(\hat{u}) = \pi_u(\hat{u}) = \text{const.}$ für $\lambda \in \mathbb{R}$, welche als Einzige in der Lage ist, das Extremalprinzip hinsichtlich λ zu erfüllen, kennzeichnet die gefundene Lösung bzw. einen Stationaritätspunkt. Da bei der Applikation der Lagrange-Multiplikator-Methode, wie oben vereinbart, von einer aktiven Kontaktbedingung ausgegangen wird, welche einen positiven reellwertigen Lagrange-Multiplikator $\lambda \in \mathbb{R}_0^+$ bzw. $\lambda \in \mathcal{M}_\lambda$, mit

$$\mathcal{M}_\lambda := \{ \lambda: \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}] \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \mid \lambda \geq 0 \}, \quad (4.75)$$

impliziert und somit die Forderung (4.66), d. h. $F_N = \lambda \geq 0$, bestätigt, liegt die gesuchte Lösung auf dem in positive λ -Richtung zeigenden roten Kurvenabschnitt. Die Eingrenzung des zulässigen Bereichs für den Lagrange-Multiplikator auf den positiven Halbraum ist eine Konsequenz aus den ursprünglich zugrunde liegenden KKT-Bedingungen

$$g \geq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad \lambda g = 0, \quad (4.76)$$

formuliert in Abhängigkeit der Verschiebung u und des Lagrange-Multiplikators λ , vgl. auch mit Gl. (3.23). Der durch die zwei Ungleichungen (4.76)₁ und (4.76)₂ sowie die Komplementaritätsbedingung (4.76)₃ abgesteckte zulässige Lösungspfad entspricht

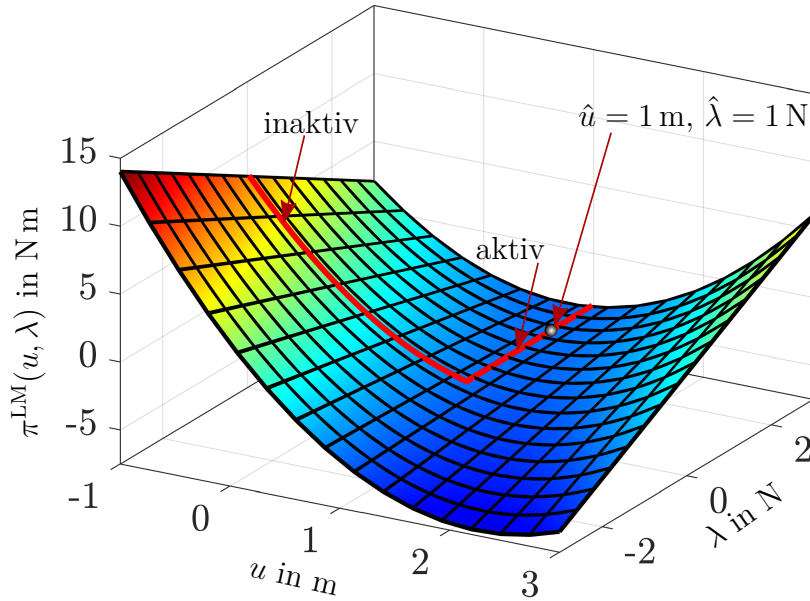


Abbildung 4.3: Darstellung der Lagrange-Funktion für das in Abb. 4.2a definierte mechanische System, einschließlich des resultierenden Lösungspunkts \hat{u} und $\hat{\lambda}$ bei aktiver Kontaktinteraktion

dem in Abb. 4.3 rot eingezeichneten, gewinkeltem Kurvenverlauf. Streng genommen entstammt auch die Variation $\delta\lambda$ dem zulässigen Lösungsraum (4.75), sodass der von der Variationsformulierung (4.71) zu Gl. (4.72) vollzogene Schritt durch $\delta\lambda \in \mathcal{M}_\lambda$ eingeschränkt wird. Mathematisch gesehen, definiert die aus der Stationaritätsforderung des Lagrange-Funktional hervorgehende Variationsformulierung (4.71) ein sogenanntes Sattelpunktproblem, siehe auch [Kikuchi und Oden, 1988; Benzi et al., 2005; Luenberger und Ye, 2008] für weitere Details, dessen Lösungspunkt einerseits ein Minimum von $\pi^{\text{LM}}(u, \lambda)$ in Bezug auf die Verschiebung u und andererseits ein Maximum von $\pi^{\text{LM}}(u, \lambda)$ in Bezug auf den Lagrange-Multiplikator λ darstellt. Die Lösung von Gl. (4.71), $u = \hat{u}$ und $\lambda = \hat{\lambda}$, entspricht damit einem Sattelpunkt mit den charakteristischen Eigenschaften

$$\pi^{\text{LM}}(\hat{u}, \lambda) \leq \pi^{\text{LM}}(\hat{u}, \hat{\lambda}) \leq \pi^{\text{LM}}(u, \hat{\lambda}) \quad \forall u \in \mathbb{R}, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

Ein weiteres Merkmal, welches sich inhärent aus einer Sattelpunktformulierung ableitet, ist die sich auf natürliche Weise ergebende Blockgestalt der Systemmatrix des linearen Gleichungssystems, vgl. Gl. (4.72).²⁰ Gleichzeitig geht mit dieser typischen Sattelpunktstruktur eine sehr schlechte Konditionszahl der Koeffizientenmatrix einher, die sich negativ auf das Konvergenzverhalten von iterativen Gleichungslösern auswirkt. Für weitere Details zur Lagrange-Multiplikator-Methode und deren Umsetzung auf Kontaktprobleme sei exemplarisch auf die Arbeiten von Bathe und Chaudhary [1985], Wriggers [2006], Hartmann [2007] und Popp [2012] referiert.

²⁰Das aus einem allgemeinen Sattelpunktproblem im Rahmen der konsistenten Linearisierung resultierende lineare Gleichungssystem besitzt eine typische Sattelpunktstruktur, siehe auch Abschnitt 5.7.

Wird aufgrund anderer Systemparameter $\{c, m, a_g, H, L_0\}$ durch Gl. (4.74) eine Adhäsionskraft, d. h. $\lambda < 0$, berechnet, ist die Annahme von Kontakt zwischen dem Feder-Masse-System und dem starren Untergrund nicht länger gültig. Aus den KKT-Bedingungen (4.76) folgt dann $\lambda = 0$ und $g(u) \geq 0$. Die in diesem Fall resultierende Verschiebungslösung $u = ma_g/c$ liefert das Prinzip vom Minimum des Gesamtpotentials (4.65).

4.5.2 Penalty Methode

Neben der Lagrange-Multiplikator-Methode hat sich in der Praxis zur Berücksichtigung der Kontaktnebenbedingungen die Penalty-Methode etabliert. Im Rahmen dieses Ansatzes wird für eine aktive Kontaktbedingung der energetische Strafterm

$$\pi_c^{\text{Pe}}(u) = \frac{1}{2} \epsilon_N \langle \bar{g}(u) \rangle^2, \quad (4.77)$$

mit dem positiven Penalty-Parameter $\epsilon_N > 0$, zur potentiellen Energie $\pi_u(u)$ hinzuaddiert. Die Definition der sogenannten Föppl- bzw. McCauley-Klammern $\langle \cdot \rangle$ sind Gl. (2.212) zu entnehmen. Damit ergibt sich für das Gesamtfunktional $\pi^{\text{Pe}}(u)$ der Ausdruck

$$\pi^{\text{Pe}}(u) = \pi_u(u) + \pi_c^{\text{Pe}}(u). \quad (4.78)$$

Gemäß der in der vorliegenden Arbeit benutzten Vorzeichenkonvention für die Klaffung g , siehe Abb. 3.3, eignet sich die Abstandsfunktion g , welche bei Durchdringung der kontaktierenden Körpern einen negativen Funktionswert annimmt, in Kombination mit der Föppl- bzw. McCauley-Klammersymbolik nicht zur Berechnung des Strafterms (4.77). Infolgedessen definieren Autoren, wie z. B. Laursen [2003], eine vorzeichenvertauschte Gap-Funktion $\bar{g} := -g$, die für $\bar{g} > 0$ einen unphysikalischen Durchdringungszustand anzeigt und im Folgenden als Penetrations- oder Eindringungsfunktion bezeichnet wird. Bezugnehmend auf das in Abb. 4.2 dargestellte Feder-Masse-System lautet diese:

$$\bar{g}(u) := L_0 - H + u \quad (4.79)$$

Wegen der dem McCauley-Operator zugeschriebenen Eigenschaft nur den positiven Teil des Operanden via

$$\langle \bar{g} \rangle = \begin{cases} \bar{g} & \text{für } \bar{g} \geq 0 \quad (\text{aktiv}) \\ 0 & \text{für } \bar{g} < 0 \quad (\text{inaktiv}) \end{cases}. \quad (4.80)$$

abzubilden,²¹ ist somit die in Gl. (4.77) definierte Beziehung in der Lage, eine Verletzung der Nichtdurchdringungsbedingung durch eine Vergrößerung der Systemenergie $\pi^{\text{Pe}}(u)$ zu sanktionieren.

Die gesuchte Verschiebungslösung u wird durch das Minimum der modifizierten Potentialfunktion (4.78) identifiziert, wobei, wie exemplarisch in Abb. 4.4 für das betrachtete Ein-

²¹Gleichwertig zu Gl. (4.80) ist die Darstellung der McCauley-Klammern als $\langle \bar{g} \rangle = \bar{g} H(\bar{g})$, wobei

$$H(\bar{g}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \bar{g} \geq 0 \\ 0 & \text{für } \bar{g} < 0 \end{cases}$$

die Heaviside-Funktion (Sprungfunktion) kennzeichnet.

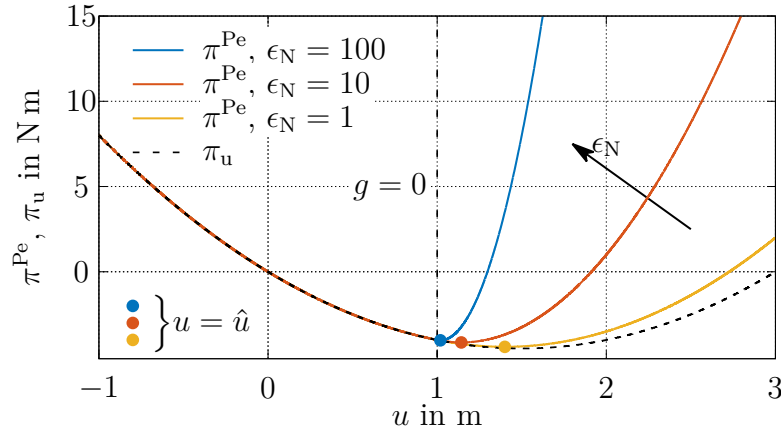


Abbildung 4.4: Darstellung des Penalty-Funktionalen für das in Abb. 4.2a definierte mechanische System, einschließlich des resultierenden Lösungspunkts \hat{u} in Abhängigkeit verschiedener Penalty-Parameter ϵ_N sowie Visualisierung der ungehinderten Systemenergie $\pi_u(u)$

freiheitsgradsystem aus Abb. 4.2a, gezeigt, $\pi_c^{\text{Pe}}(u)$ das gesuchte Extremum mit steigenden Penalty-Parameter ϵ_N in Richtung einer annähernd erfüllten Inpenetrabilitätsbedingung verschiebt. Die Variation des Funktionalen $\pi^{\text{Pe}}(u)$ nach der einzigen Primärvariablen u und die Forderung nach Stationarität lauten

$$\delta\pi^{\text{Pe}}(u, \delta u) = \delta\pi_u(u, \delta u) + \delta\pi_c^{\text{Pe}}(u, \delta u) = \delta u(cu - ma_g) + \epsilon_N \langle \bar{g}(u) \rangle \delta \bar{g} = 0, \quad (4.81)$$

sodass für den a priori angenommenen Kontaktfall, der $\langle \bar{g}(u) \rangle = \bar{g}(u)$ und $\delta \bar{g} = \delta u$ impliziert, die lineare Gleichung

$$cu - ma_g + \epsilon_N \bar{g}(u) = 0, \quad \text{mit der Lösung} \quad \hat{u} := u = \frac{H - L_0 + ma_g/\epsilon_N}{1 + c/\epsilon_N}, \quad (4.82)$$

resultiert. Es ist offensichtlich, dass der Penalty-Ansatz im Gegensatz zur Lagrange-Multiplikator-Methode die geometrische Inpenetrabilitätsbedingung (4.68) nicht exakt erfüllt. Demgegenüber vermeidet jedoch die Penalty-Methode, die Notwendigkeit die Stationarität in Bezug auf zwei unabhängige Variablengruppen zu fordern, sodass lediglich ein Gleichungssystem in Abhängigkeit der Verschiebungen zu lösen ist, siehe hierzu auch [Laursen, 2003, S. 90].²² Im Vergleich zu einem ungehinderten mechanischen System verändert sich die Dimension des Gleichungssystem durch Berücksichtigung der Kontaktbedingungen also nicht. Wird die Verschiebungslösung (4.82)₂ in Gl. (4.79) eingesetzt, ergibt sich als Maß für die Eindringung

$$\bar{g}(\hat{u}) = \frac{ma_g - c(H - L_0)}{c + \epsilon_N} \geq 0. \quad (4.83)$$

Das in Abb. 4.5a illustrierte rheologische Modell vermittelt hierfür eine anschauliche mechanische Interpretation. Dringt der Massenpunkt m in das starre Fundament ein,

²²Eine explizite schwache Formulierung der Nichtdurchdringungsbedingung, wie die Erfüllung des Terms $\delta\lambda g(u)$ in Gleichung (4.71) fordert, ist in Bezug auf den Penalty-Ansatz nicht präsent.

wird eine Normalkraftfeder mit der Federsteifigkeit ϵ_N , die zu einer proportionalen Rückstellkraft

$$F_N(u) = \epsilon_N \langle \bar{g}(u) \rangle \quad (4.84)$$

in Abhängigkeit von $\langle \bar{g}(u) \rangle$ führt, aktiviert. Bei einer Lücke, d. h. $\bar{g}(u) < 0$, deaktivieren die McCauley-Klammern die Feder wieder. Darüber hinaus zeichnet sich das einfache Verhalten der Rückstellfeder bereits in der Struktur für den sanktionierten Energieterm (4.77) ab. Wird die Verschiebungslösung (4.82)₂ nun in Gl. (4.84) eingesetzt, mündet dies in der approximierten Normalkontaktkraft

$$F_N(\hat{u}) = \frac{\epsilon_N (ma_g - c(H - L_0))}{c + \epsilon_N} \geq 0. \quad (4.85)$$

Algorithmisch induziert der präsentierte Penalty-Ansatz eine Regularisierung der KKT-Bedingungen für Normalkontakt, die gemäß Gl. (4.84) einen direkten Zusammenhang zwischen einer nun zulässigen Durchdringung und einer daraus resultierenden Kontaktkraft herstellen. In Abb. 4.5b ist dieser Zusammenhang neben dem mehrdeutigen

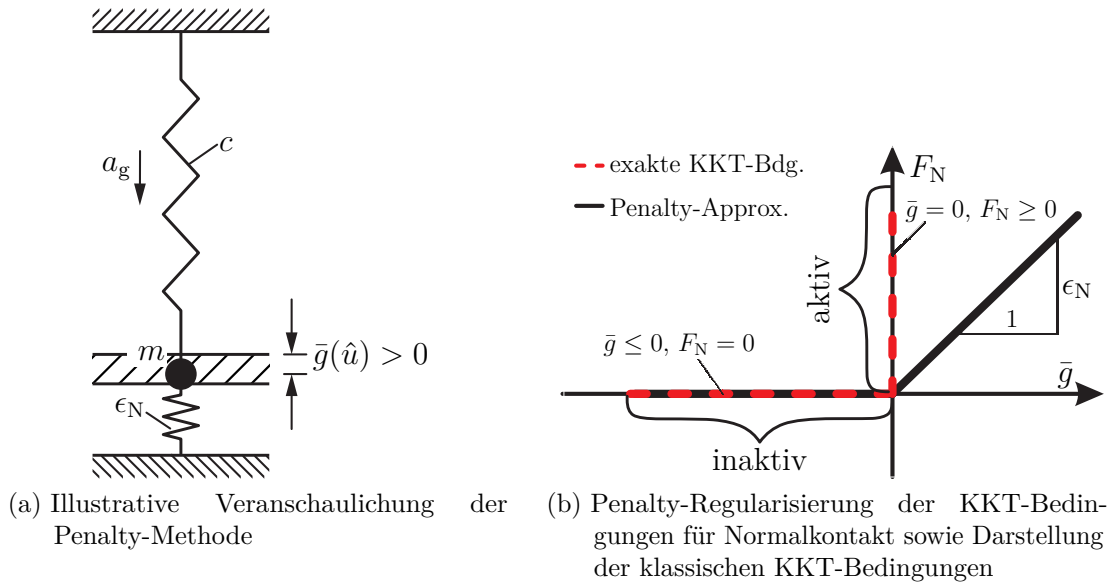


Abbildung 4.5: Mechanische Interpretation der Penalty-Methode sowie schematische Illustration der Penalty-Approximation zum Imitieren der reibungslosen KKT-Bedingungen

Funktionsverlauf für die klassischen KKT-Bedingungen grafisch veranschaulicht.

Wie bereits aus den Aussagen (4.82)₂, (4.83) und (4.85) sowie intuitiv aus der Vorstellung einer sehr steifen Rückstellfeder deduziert werden kann, liefert die Penalty-Methode für $\epsilon_N \rightarrow \infty$ die gleichen Resultate wie die Lagrange-Multiplikator-Methode. Es gilt:

$$\lim_{\epsilon_N \rightarrow \infty} \hat{u} = H - L_0, \quad \lim_{\epsilon_N \rightarrow \infty} \bar{g}(\hat{u}) = 0, \quad \lim_{\epsilon_N \rightarrow \infty} F_N(\hat{u}) = \hat{\lambda} = ma_g - c(H - L_0) \quad (4.86)$$

Dieser Sachverhalt ist auch anhand des schematischen Diagramms 4.5b nachvollziehbar, da die regularisierte Funktionskurve mit zunehmenden Penalty-Parameter gegen die exakten KKT-Bedingungen strebt.

Eine Kontaktformulierung basierend auf einem Penalty-Ansatz hat aufgrund der leichten Implementierbarkeit in Berechnungsprogrammen, der Tatsache, dass keine zusätzlichen unbekannten Interfacegrößen in die Formulierung einfließen, und einer hieraus resultierenden, nachweislichen Effektivität weite Verbreitung in der numerischen Kontaktmechanik erlangt. Weiterhin hält der Penalty-Ansatz zudem die Möglichkeit der Integration einer simplen Aktiven-Mengen-Strategie bereit, da aktive Kontaktbedingungen bereits mit Hilfe des McCauley-Operators identifiziert werden können. Als ein der Regularisierungsstrategie anhaftendes Defizit muss jedoch die Verletzung der Nichtdurchdringungsbedingung genannt werden. Um die Nichteinhaltung der geometrischen Inpenetrabilitätsbedingung in akzeptablen Grenzen zu halten, ist die Wahl eines sehr großen problemspezifischen Penalty-Parameters notwendig. Parallel hierzu geht mit dem Einbau der nach den Verschiebungen linearisierten Strafterme, welche mit dem Penalty-Parameter skaliert werden, eine schlechte Kondition der Funktionalmatrix einher, was sich beispielsweise negativ auf das Konvergenzverhalten von iterativen Gleichungslösern auswirkt, siehe hierzu z. B. [Benzi et al., 2005]. Für weitere Details zur Penalty-Methode und deren Umsetzung auf Kontaktprobleme sollte der interessierte Leser [Oden, 1981; Jung-Ho und Noboru, 1985; Hallquist et al., 1985; Curnier und Alart, 1988; Wriggers et al., 1990; Laursen, 2003; Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Yang et al., 2005; Wriggers, 2006] konsultieren.

4.5.3 Augmented-Lagrange-Methode

Eine weitere Strategie, um der Nichtdifferenzierbarkeit der Kontaktbedingungen zu begegnen ist die Augmented-Lagrange-Methode, die Elemente der Lagrange- und der Penalty-Methode kombiniert, siehe Abschnitte 4.5.1 und 4.5.2. Dieser Kompromiss erlaubt neben einer exakten Repräsentation der Kontaktbedingungen auch eine Regularisierung der in Ungleichungsform gegebenen Zwangsgleichungen, siehe Gl. (4.76), durch die in dem Funktional integrierten un stetigen Stafterme. In Anlehnung an das Normalkontaktbeispiel aus Abb. 4.2 wird das gemischte Funktional

$$\pi^{\text{AL}}(u, \lambda) = \pi_{\text{u}}(u) + \pi_{\text{c}}^{\text{AL}}(u, \lambda), \quad \text{mit} \quad \pi_{\text{c}}^{\text{AL}}(u, \lambda) = \frac{1}{2\epsilon_{\text{N}}} \langle \lambda + \epsilon_{\text{N}} \bar{g}(u) \rangle^2 - \frac{\lambda^2}{2\epsilon_{\text{N}}} \quad (4.87)$$

betrachtet, welches den Lagrange-Multiplikator λ als eine vom Untergrund auf die Punktmasse m übertragene Reaktionskraft und weitere Terme in Abhängigkeit des Penalty-Parameters ϵ_{N} enthält. Abb. 4.6 veranschaulicht das Energiefunktional (4.87) grafisch. Die Forderung nach Stationarität, d. h.

$$\begin{aligned} \delta \pi^{\text{AL}}(u, \delta u, \lambda, \delta \lambda) &= \delta \pi_{\text{u}}(u, \delta u) + \delta \pi_{\text{c}}^{\text{AL}}(u, \delta u, \lambda, \delta \lambda) = 0 \\ \Rightarrow \quad \delta u (cu - ma_{\text{g}} + \langle \lambda + \epsilon_{\text{N}} \bar{g}(u) \rangle) &= 0 \quad \forall \delta u \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (4.88)$$

$$\Rightarrow \quad \delta \lambda \left(\frac{1}{\epsilon_{\text{N}}} \langle \lambda + \epsilon_{\text{N}} \bar{g}(u) \rangle - \frac{\lambda}{\epsilon_{\text{N}}} \right) = 0 \quad \forall \delta \lambda \in \mathcal{M}_{\lambda}, \quad (4.89)$$

führt erneut auf ein Sattelpunktproblem. Unter Beachtung der Beziehungen $\lambda > 0$, $\delta \lambda \in \mathcal{M}_{\lambda}$ und $\bar{g} \geq 0$, die wegen des behandelten Kontaktfalls der Punktmasse m mit dem starren Fundament vorliegen und $\langle \lambda + \epsilon_{\text{N}} \bar{g} \rangle = \lambda + \epsilon_{\text{N}} \bar{g}$ implizieren, resultiert

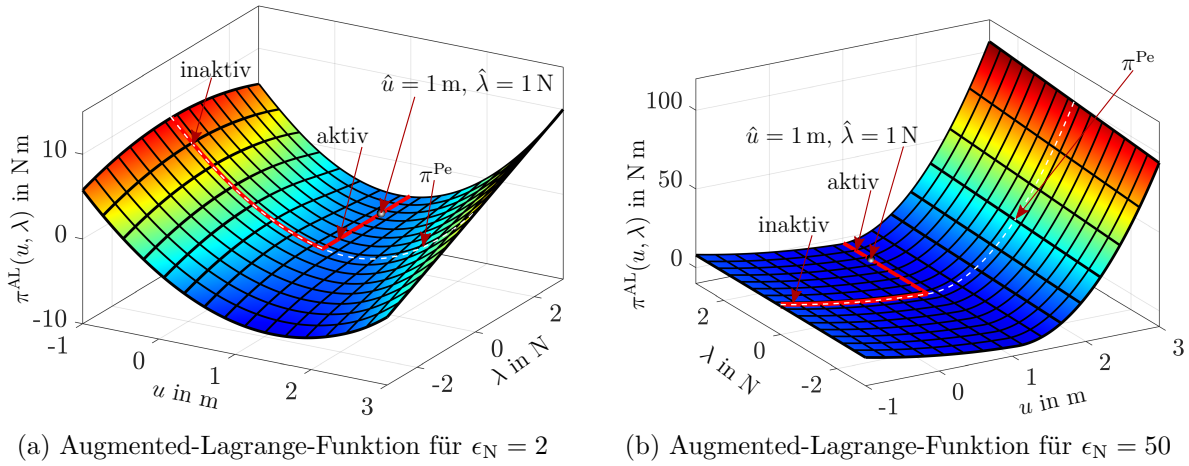


Abbildung 4.6: Darstellung des Augmented-Lagrange-Funktional für das in Abb. 4.2 visualisierte Normalkontaktbeispiel, einschließlich des resultierenden Lösungspunkts \hat{u} und $\hat{\lambda}$

aus der schwachen Formulierung der Kontaktbedingung (4.89) der Ausdruck $\bar{g}(u) = 0$. Gleichzeitig veranlasst die identische Erfüllung der Nichtdurchdringungsbedingung ein Verschwinden des Strafterms in der virtuellen Kontaktarbeit, siehe Gl. (4.88), sodass die Lösung des Sattelpunktproblems (4.88) und (4.89) mit der Lösung der Lagrange-Multiplikator-Methode kongruent ist. Der geschilderte Sachverhalt kann auch anhand der Lösung des linearen Gleichungssystems mit der typischen Sattelpunktstruktur

$$\begin{bmatrix} c + \epsilon_N & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} ma_g + \epsilon_N(H - L_0) \\ H - L_0 \end{Bmatrix}, \quad (4.90)$$

welches für zulässige Variationen $\delta u \in \mathbb{R}$ und $\delta \lambda \in \mathcal{M}_\lambda$ aus den Gl. (4.88) und (4.89) sowie der Definition (4.79) für die Eindringungsfunktion $\bar{g}(u)$ herrührt, nachgeprüft werden. Es ist offensichtlich, dass die Lösung von Gl. (4.90)

$$\hat{u} := u = H - L_0 \quad \text{und} \quad \hat{\lambda} := \lambda = ma_g - c(H - L_0) \quad (4.91)$$

mit den Lagrange-Multiplikator-Gegenstücken (4.73) und (4.74) übereinstimmt. Eine Gegenüberstellung der beiden Potentialbeziehungen (4.70) und (4.87) bzw. der zwei Abb. 4.3 und 4.6 enthüllt jedoch, dass die beiden Funktionsverläufe gravierend voneinander abweichen. Ebenso wie die Penalty-Methode bestraft das Augmented-Lagrange-Funktional (4.87)₂ eine Verletzung der geometrischen Nichtdurchdringungsbedingung (4.64) durch einen erheblichen Energiezuwachs, wodurch das um π_c^{AL} erweiterte Potential π^{AL} in der Nähe der Lösung die günstige Eigenschaft der Konvexität erhält. Im Kontrast zum Penalty-Optimierungsverfahren verfälscht die in das Funktional (4.87)₂ integrierte Regularisierung jedoch nicht die Lösung des Kontaktproblems, sondern liefert für beliebige endliche Werte $\epsilon_N > 0$ eine zur Lagrange-Multiplikator-Methode identische Lösung.

Für die Umsetzung der Augmented-Lagrange-Methode existieren prinzipiell zwei unterschiedliche Varianten. Eine mögliche Implementierung der Augmented-Lagrange-Methode,

die u. a. in den Arbeiten von Curnier und Alart [1988], Alart und Curnier [1991], Heegaard und Curnier [1993], Pietrzak und Curnier [1999], Oliveira et al. [2008] und Cavalieri und Cardona [2013a] aufgegriffen wird, belässt die Lagrange-Multiplikatoren als unabhängige Primärvariable in dem gekoppelten Gleichungssystem, sodass eine simultane Lösungsprozedur erforderlich ist. Wie im vorausgegangenen Absatz bekundet, liegt die Intention dieser Variante darin, eine mit Lagrange-Multiplikatoren ausgestattete Formulierung mit algorithmisch verbesserten Lösungseigenschaften zu konstruieren. Darüber hinaus zeigt [Popp, 2012], dass die mit der Augmented-Lagrange-Methode regularisierte Variationsformulierung und die in Abschnitt 5.5.5 vorgestellte Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie (PDASS) auf Basis nichtlinearer Komplementaritätsfunktionen in identischen Kontaktbedingungen münden. Aus diesem Grund können die in der vorliegenden Arbeit applizierte PDASS und die Augmented-Lagrange-Methode als zwei unterschiedliche Interpretationen des selben Umstands, welcher sich in der Notwendigkeit einer Regularisierung²³ zur effizienten numerischen Behandlung der nicht glatten KKT-Bedingungen ausdrückt, aufgefasst werden.

Weitaus häufiger findet jedoch die Augmented-Lagrange-Methode in Gestalt eines rekursiven Schemas, dem sogenannten Uzawa-Algorithmus, Anwendung, siehe hierzu beispielsweise [Simo und Laursen, 1992; Laursen und Simo, 1993b; Laursen und Govindjee, 1994; Zavarise et al., 1995; Zavarise et al., 1998; Laursen, 2003; Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Temizer, 2012; Temizer et al., 2012; Temizer, 2013]. Der Grundgedanke bei dieser Version der Augmented-Lagrange-Methode ist, dass der Lagrange-Multiplikator λ zunächst eine gegebene Größe repräsentiert, wodurch dieser als zusätzliche Unbekannte entfällt, und erst innerhalb einer iterativen Prozedur an den exakten Wert der Lösung $\hat{\lambda}$ angenähert wird. Die im Verlauf eines Iterationsschritts (k) bei festgehaltenen Lagrange-Multiplikator $\lambda^{(k)} \geq 0$ zu lösende Variationsformulierung lautet:

$$\begin{aligned} \delta\pi^{\text{AL}}(u^{(k)}, \delta u) &= \delta\pi_{\text{u}}(u^{(k)}, \delta u) + \delta\pi_{\text{c}}^{\text{AL}}(u^{(k)}, \delta u) = 0 \\ \Rightarrow \quad \delta u \left(cu^{(k)} - ma_{\text{g}} + \langle \lambda^{(k)} + \epsilon_{\text{N}} \bar{g}(u^{(k)}) \rangle \right) &= 0 \quad \forall \delta u \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (4.92)$$

Damit kann Gl. (4.92) direkt nach der unbekannten Verschiebung $u^{(k)}$ aufgelöst werden. Die Aktualisierung des Lagrange-Multiplikators erfolgt in Anlehnung an die Penalty-Methode nach der Vorschrift²⁴

$$\lambda^{(k+1)} = \langle \lambda^{(k)} + \epsilon_{\text{N}} \bar{g}(u^{(k)}) \rangle, \quad (4.93)$$

welche gemäß Laursen [2003, S. 93] einer diskreten punktwisen Approximation der regularisierten Kontaktbedingungen in integraler Form entspricht. Für gewöhnlich startet die Prozedur mit der Initialisierung $\lambda^{(0)} = 0$, wodurch der erste Rekursionsschritt $k = 0$ identisch zu der in Abschnitt 4.5.2 vorgestellten Penalty-Methode ist.²⁵ Den Ablauf der iterativen Vorgehensweise fasst Tab. 4.9 noch einmal zusammen. Die äußere

²³Solange die Lösung des Kontaktproblems noch nicht voll ausiteriert ist, gestatten die regularisierten Kontaktbedingungen eine leichte Verletzung der eigentlich nachzubildenden KKT-Bedingungen.

²⁴Vergleiche auch mit Gl. (4.89).

²⁵Wird das Rekursionsschema bereits nach der ersten Iteration beendet, entspricht dies der Anwendung der Penalty-Methode.

Tabelle 4.9: Ablaufschema für den Uzawa-Algorithmus am Beispiel des in Kontaktinteraktionen involvierten Einfreiheitsgradsystem aus Abb. 4.2

Gegeben/Initialisierung: $\lambda^{(0)} = 0, \epsilon_N$
Wiederhole $k = 0, \dots$
Löse Gleichung für unbekannte Verschiebung $u^{(k)}$ $cu^{(k)} - ma_g + \langle \lambda^{(k)} + \epsilon_N \bar{g}(u^{(k)}) \rangle = 0 \rightsquigarrow u^{(k)}$ Aktualisiere Lagrange-Multiplikator $\lambda^{(k+1)} = \langle \lambda^{(k)} + \epsilon_N \bar{g}(u^{(k)}) \rangle \rightsquigarrow \lambda^{(k+1)}$
Bis Konvergenzkriterium $\bar{g}(u^{(k)}) < \text{tol}_{\bar{g}}$ erfüllt ist

Iterationsschleife zur Korrektur des Lagrange-Multiplikators wird solange wiederholt, bis ein vom Nutzer vorgegebenes Konvergenzkriterium, welches beispielsweise die Verletzung der Nichtdurchdringungsbedingung im Kontaktfall $g(u^{(k)}) = 0$ überwacht, eingehalten wird. Eine schematische Veranschaulichung des Uzawa-Algorithmus für das betrachtete Kontaktbeispiel aus Abb. 4.2 zeigt Abb. 4.7a. Ebenso wie die weiter oben erwähnte simultane Version der Augmented-Lagrange-Methode ist der Uzawa-Algorithmus für $k \rightarrow \infty$ bzw. äquivalent hierzu bei Erreichen des korrekten Wertes für den Lagrange-Multiplikator, in der Lage die Inpenetrabilitätsbedingung exakt zu erfüllen, siehe hierzu auch [Konyukhov und Izi, 2015, S. 9–11]. Weiterhin verfügt diese Variante über den Vorteil, dass durch Festhalten der Lagrange-Multiplikatoren in der Variationsgleichung (4.92) keine zusätzlichen unbekannten Interfacegrößen in der Kontaktformulierung auftreten. Damit verändert sich die Dimension der Gleichungssysteme während des Lösungsprozesses nicht. Dieser Reduktionsvorteil geht jedoch mit dem Nachteil einher, dass um die in Abschnitt 5.3 vorgestellte iterative Lösungsprozedur zur Behandlung der nichtlinearen Gleichungssysteme herum eine weitere Rekursionsschleife zur Aktualisierung der Lagrange-Multiplikatoren durchlaufen werden muss. Da die Augmented-Lagrange-Methode in Gestalt des Uzawa-Algorithmus lediglich mit einer linearen Konvergenzrate, welche erheblich von der Wahl des Penalty-Parameters abhängt, gegen die exakte Erfüllung der Inpenetrabilitätsbedingung strebt, wird die geschachtelte Iterationsprozedur oftmals mit heuristischen Beschleunigungstechniken kombiniert, siehe hierzu z. B. [Zavarise und Wriggers, 1999; Zavarise und De Lorenzis, 2012]. Abb. 4.7b reflektiert den beschriebenen Sachverhalt.

4.5.4 Perturbed-Lagrange-Methode

Die erste hybride Methode, welche sehr erfolgreich in der Pionierarbeit von Simo et al. [1985b] zur Behandlung von Kontaktproblemen eingesetzt wurde, war eine Perturbed-Lagrange-Formulierung. Bezugnehmend auf das betrachtete Anwendungsbeispiel, siehe Abb. 4.2, kombiniert dieser spezielle Ansatz die Lagrange-Multiplikator- und die Penalty-

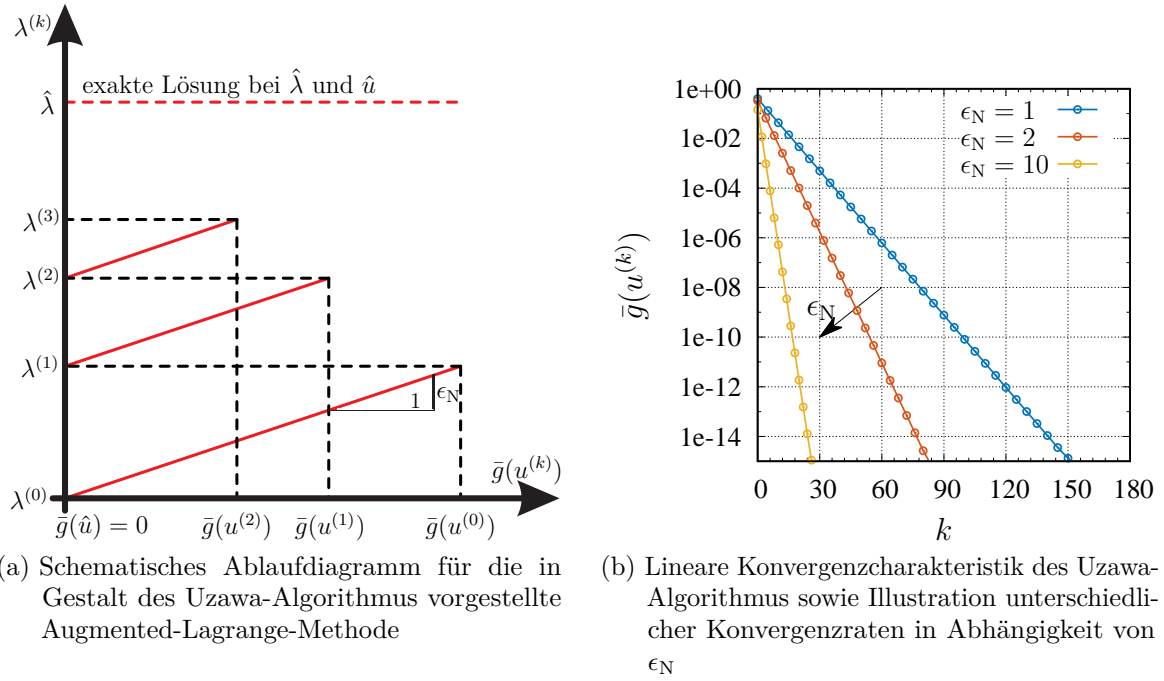


Abbildung 4.7: Schematisches Ablaufdiagramm und Konvergenzeigenschaften zur Erfüllung der Inpenetrabilitätsbedingung für die Augmented-Lagrange-Methode in Gestalt des Uzawa-Algorithmus für das in Abb. 4.2 visualisierte Normalkontaktbeispiel

Methode in einem gemischten Funktional der Gestalt

$$\pi^{\text{PL}}(u, \lambda) = \pi_u(u) + \pi_c^{\text{PL}}(u, \lambda), \quad \text{mit} \quad \pi_c^{\text{PL}}(u, \lambda) = -\lambda g(u) - \frac{\lambda^2}{2\epsilon_N}. \quad (4.94)$$

Die alternative Bezeichnung der vorliegenden Formulierung als gestörte Lagrange-Multiplikator-Methode geht auf den Umstand zurück, dass sich die Perturbed-Lagrange-Methode durch Hinzufügen eines quadratischen Strafterms zum klassischen Lagrange-Multiplikator-Ansatz (4.70) gewinnen lässt. Analog zur Augmented-Lagrange-Methode aus dem vorhergehenden Abschnitt 4.5.3 führt der Penalty-Term (4.94)₂ eine Regularisierung herbei. Abb. 4.8 visualisiert den zugehörigen Verlauf für das Funktional (4.94) im Rahmen einer aktiven Kontaktinteraktion. Aus der Variation nach den Primärvariablen u und λ resultiert das Sattelpunktproblem

$$\begin{aligned} \delta \pi^{\text{PL}}(u, \delta u, \lambda, \delta \lambda) &= \delta \pi_u(u, \delta u) + \delta \pi_c^{\text{PL}}(u, \delta u, \lambda, \delta \lambda) = 0 \\ \Rightarrow \quad \delta u (cu - ma_g) - \lambda \delta g &= 0 & \forall \delta u \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (4.95)$$

$$\Rightarrow \quad -\delta \lambda \left(g(u) + \frac{\lambda}{\epsilon_N} \right) = 0 \quad \forall \delta \lambda \in \mathcal{M}_\lambda, \quad (4.96)$$

welches unter Berücksichtigung von $\delta g = -\delta u$ und Definition (4.68) in dem linearen Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} c & 1 \\ 1 & -1/\epsilon_N \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} ma_g \\ H - L_0 \end{Bmatrix} \quad (4.97)$$

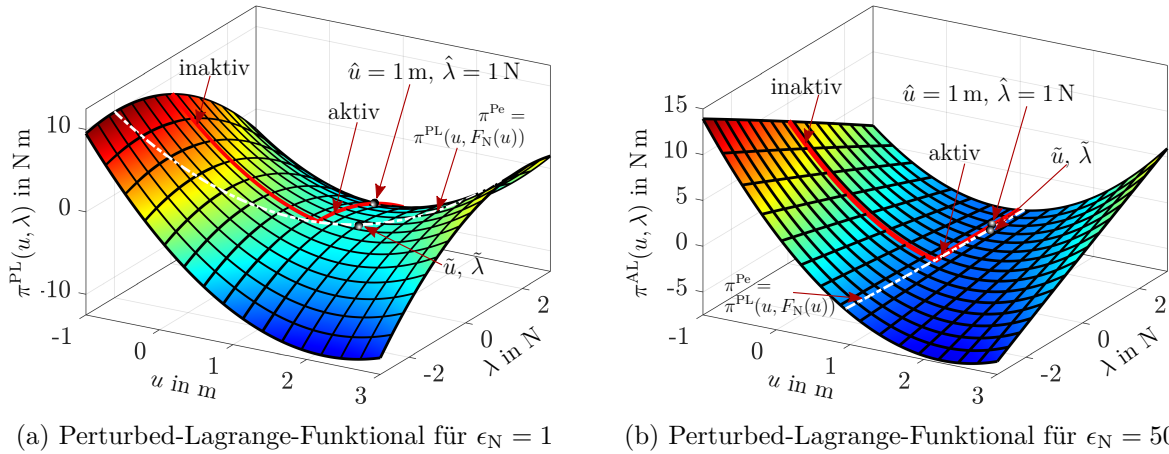


Abbildung 4.8: Darstellung des Perturbed-Lagrange-Funktional für das in Abb. 4.2 visualisierte Normalkontaktbeispiel, einschließlich des resultierenden Lösungspunkts \tilde{u} und $\tilde{\lambda}$ bei aktiver Kontaktinteraktion

mündet. Die entsprechende Lösung zu Gl. (4.97) lautet:

$$\tilde{u} := u = \frac{H - L_0 + ma_g/\epsilon_N}{1 + c/\epsilon_N} \quad \text{und} \quad \tilde{\lambda} := \lambda = \frac{\epsilon_N(ma_g - c(H - L_0))}{c + \epsilon_N} \quad (4.98)$$

Wie Simo et al. [1985b] hervorheben, besitzt die gestörte Version der Lagrange-Multiplikator-Methode die vorteilhafte Eigenschaft, dass im Vergleich zu Gl. (4.72) oder Gl. (4.90), nicht länger Nulleinträge auf der Hauptdiagonalen der Funktionalmatrix, siehe Gl. (4.97), präsent sind. Von einem numerischen Standpunkt aus betrachtet, wirkt sich dieses Merkmal positiv auf die Kondition des linearisierten Gleichungssystems aus. Sinngemäß zur Penalty-Methode lässt sich zudem für die Lösung (4.98) eine starke Sensitivität gegenüber dem algorithmischen Parameter ϵ_N identifizieren. Für $\epsilon_N \rightarrow \infty$ liefert der hybride Ansatz die Lösung der klassischen Lagrange-Multiplikator-Methode, siehe Gl. (4.73) und (4.74). Es gilt:

$$\lim_{\epsilon_N \rightarrow \infty} \tilde{u} = H - L_0 \quad \text{und} \quad \lim_{\epsilon_N \rightarrow \infty} \tilde{\lambda} = ma_g - c(H - L_0) \quad (4.99)$$

Obwohl der nachfolgend genannte Zusammenhang die eigentliche Intention der Perturbed-Lagrange-Methode nicht zutreffend beschreibt, kann ungeachtet dessen durch Rücksubstitution der Beziehung $\lambda := F_N(u) = -\epsilon_N g(u) = \epsilon_N \bar{g}(u)$, die zweifelsfrei die schwache Formulierung (4.96) erfüllt, in Gl. (4.95) die Standard-Penalty-Methode abgeleitet werden, siehe hierzu auch [Wriggers, 2006, S. 124]. Aus diesem Grund stimmen die Beziehungen aus Gl. (4.98) mit denen der Penalty-Methode, vgl. mit den Ausdrücken (4.82)₂ und (4.85), überein.

Weiterhin ist anzumerken, dass die Perturbed-Lagrange-Formulierung auch als Ausgangspunkt zur Konstruktion von gemischten Finite-Elemente-Formulierungen, die unterschiedliche Approximationsfunktionen für das Verschiebungsfeld und die Lagrange-Multiplikatoren verwenden, verstanden werden kann. Eine erste Realisierung solch eines

Algorithmus in Kombination mit einer sich auf natürlicherweise aus der Perturbed-Lagrange-Formulierung ergebenden „Segment-zu-Segment“-Diskretisierungsstrategie für das Kontakt-Interface, siehe Abschnitt 5.5, wurde in [Simo et al., 1985b] vorgestellt. Diese aufgrund beachtlicher Flexibilität und Genauigkeit ausgestattete Kontaktformulierung repräsentierte über einen weiten Zeitraum den Stand der Technik im Bereich der numerischen Kontaktmechanik.

4.5.5 Nitsche-Methode

Ursprünglich von Nitsche [1971] zur Einbindung von variationell formulierten Dirichlet-Randbedingungen entwickelt, repräsentiert die Nitsche-Methode ein weiteres Werkzeug zur Erzwingung von Kontaktbedingungen. Im Gegensatz zu den bisher vorgestellten gemischten Ansätzen verfolgt die Nitsche-Methode ein alternatives Konzept. Anstatt durch zusätzliche Lagrange-Multiplikatoren werden die im Kontakt-Interface wirkenden Kräfte mit Hilfe der Spannungszustände in den kontaktierenden Körpern, die wiederum ein unmittelbares Resultat der jeweiligen Konstitutivbeziehungen darstellen, ermittelt. Bezugnehmend auf das in Abb. 4.2 betrachtete Signorini-Kontaktproblem ist jedoch in dem als Starrkörper modellierten Fundament, aufgrund der untersagten Deformation, eine Berechnung der Spannungen ausgeschlossen. Dies hat zur Konsequenz, dass in die in diesem Abschnitt propagierte Version der Nitsche-Methode lediglich eine dem Feder-Masse-System zugeordnete innere Beanspruchungsgröße in Form der Normalschnittkraft

$$N(u) = F_c(u) - ma_g, \quad \text{mit} \quad F_c(u) = cu, \quad (4.100)$$

einfließt, siehe auch Abb. 4.9a. Für allgemeinere, unvoreingenommene Formulierungen

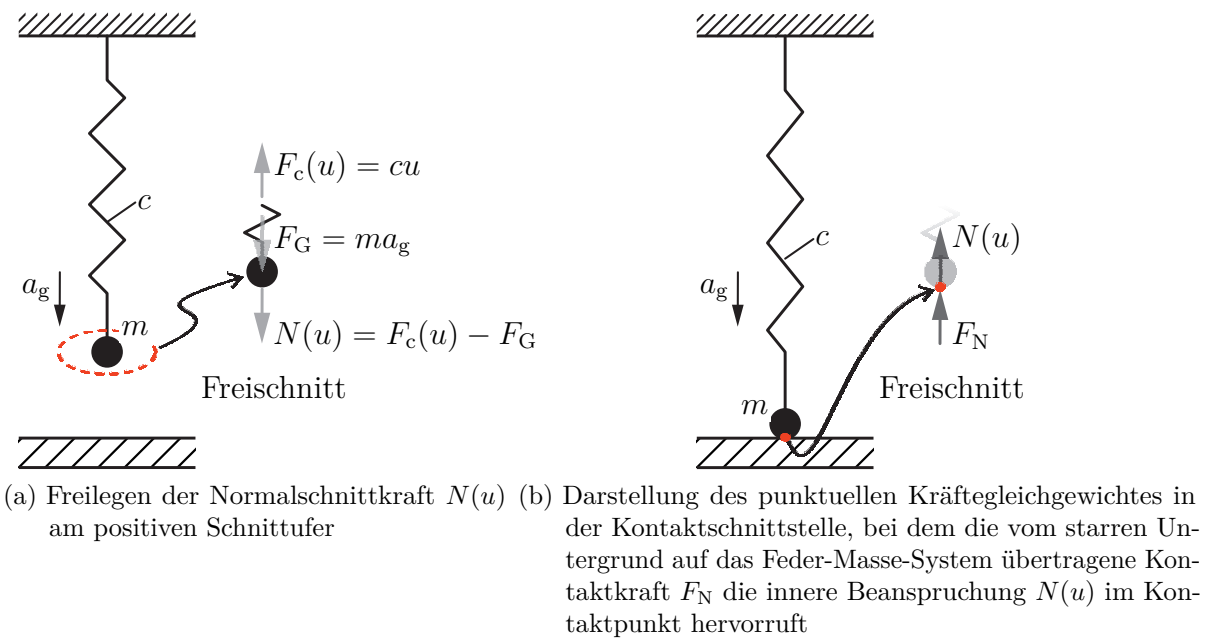


Abbildung 4.9: Illustrationsskizzen zur Veranschaulichung der Nitsche-Methode

der Nitsche-Methode sei auf die Arbeiten von Wriggers und Zavarise [2007] Wriggers [2006, S. 122–123] sowie Konyukhov und Izi [2015] und Mlika et al. [2017] verwiesen. Detailliertere mathematische Untersuchungen zu verschiedenen Versionen der Nitsche-Methode sind z. B. [Stenberg, 1998; Hansbo und Hansbo, 2002; Becker et al., 2003; Hansbo und Hansbo, 2004; Hansbo, 2005; Pönitz, Kornelia, 2006; Juntunen und Stenberg, 2009; Burman, 2012; Annavarapu et al., 2012; Chouly, 2013; Chouly und Hild, 2013; Chouly, 2014; Chouly et al., 2014; Chouly et al., 2015; Chouly et al., 2016; Burman et al., 2016] zu entnehmen. Damit lässt sich das zugehörige Funktional, welches zudem in Abb. 4.10 illustriert ist, wie folgt ausdrücken:

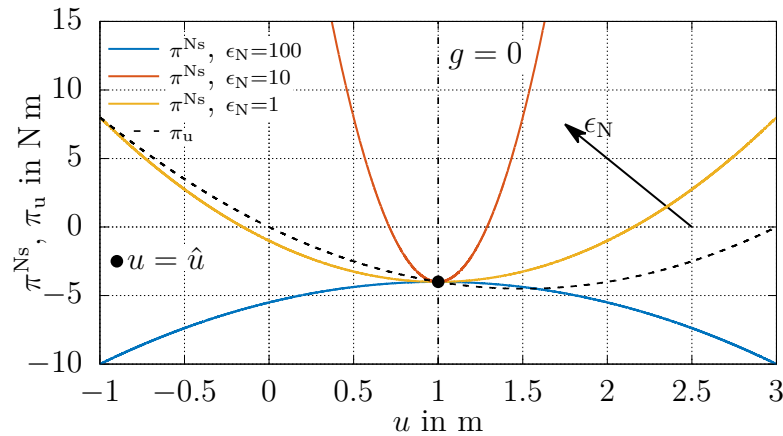


Abbildung 4.10: Darstellung des Nitsche-Funktional für das in Abb. 4.2a definierte mechanische System, einschließlich des resultierenden Lösungspunkts \hat{u} in Abhängigkeit verschiedener Penalty-Parameter ϵ_N sowie Visualisierung der ungehinderten Systemenergie $\pi_u(u)$

$$\pi^{\text{Ns}}(u) = \pi_u(u) + \pi_c^{\text{Ns}}(u), \quad \text{mit} \quad \pi_c^{\text{Ns}}(u) = N(u)g(u) + \frac{1}{2}\epsilon_N(g(u))^2 \quad (4.101)$$

Das am Feder-Masse-System punktuell aufgestellte Kräftegleichgewicht in der Kontaktschnittstelle, siehe auch Abb. 4.9b, liefert $F_N := \lambda = -N(u) = ma_g - F_c(u)$, sodass der erste Summand in Gl. (4.101)₂ die Interpretation eines Lagrange-Multiplikator-Derivats, bei der die reaktive Kontaktkraft $F_N := \lambda$ durch eine um das Eigengewicht der Punktmasse erweiterte linear-elastische Materialantwort $-F_c(u)$ substituiert wird, zulässt. Da sich jedoch die innere Beanspruchungsgröße $N(u)$ als Funktion der Verschiebungen berechnen lässt, sind im Gegensatz zur Lagrange-Multiplikator-, Augmented-Lagrange- und Perturbed-Lagrange-Methode keine zusätzlichen Interfacegrößen erforderlich. Es ergibt sich damit eine Kontaktformulierung, welche lediglich von der ursprünglich unbekannten Primärvariablen u abhängt. Wie beispielsweise Wriggers und Zavarise [2007] zeigen, trägt der verbleibende Summand in Gl. (4.101), der eine identische Struktur zum Strafterm (4.77) der Standard-Penalty-Methode aufweist, zu einer Stabilisierung der Nitsche-Methode bei. Dieser Anteil, mit dem Penalty-Parameter ϵ_N , wird eingebunden, um der aus der Formulierung resultierenden schlechten Konditionierung des globalen

linearisierten Gleichungssysteme entgegenzuwirken. Wie nachfolgend anhand des einfachen Einführungsbeispiels aus Abb. 4.2 demonstriert wird, erzwingt die Nitsche-Methode die geometrische Nichtdurchdringungsbedingung exakt. Dies hat zur Folge, dass der Strafterm in Bezug auf eine ausiterierte Verschiebungslösung \hat{u} nicht länger aktiv ist und damit der Einfluss des algorithmischen Parameters ϵ_N auf \hat{u} vollständig entfällt. Um dies zu zeigen, soll die erste Variation von Gl. (4.101) gebildet werden. Unter Berücksichtigung der Definitionen (4.68) und (4.100) sowie der Beziehungen $\delta g = -\delta u$ und $\delta N = c\delta u$ gilt

$$\begin{aligned}\delta\pi^{\text{Ns}}(u, \delta u) &= \delta\pi_u(u, \delta u) + \delta\pi_c^{\text{Ns}}(u, \delta u) = 0 \\ \Rightarrow \quad \delta u (cu - ma_g) + \delta N g(u) + N \delta g + \epsilon_N g(u) \delta g &= 0 \quad \forall \delta u \in \mathbb{R}\end{aligned}\quad (4.102)$$

bzw.

$$\Rightarrow \quad \delta u (cu - ma_g + cg(u) - (cu - ma_g) - \epsilon_N g(u)) = 0 \quad \forall \delta u \in \mathbb{R}. \quad (4.103)$$

Offensichtlich folgt für $c \neq \epsilon_N$ unmittelbar aus der skalaren Gleichung (4.103)

$$(c - \epsilon_N)g(u) = 0 \quad \Rightarrow \quad g(u) = 0 \quad \Rightarrow \quad u = H - L_0 := \hat{u}, \quad (4.104)$$

also die exakte Erfüllung der Inpenetrabilitätsbedingung im Kontaktfall. Die im Interface wirkende Kontaktkraft $F_N(\hat{u})$ ergibt sich als Resultat von Gl. (4.100) zu

$$F_N(\hat{u}) = -N(\hat{u}) = ma_g - c(H - L_0). \quad (4.105)$$

Die Nitsche-Methode repräsentiert sich damit als ein interessantes Lagrange-Multiplikator-Derivat, welches die Nachteile von gemischten Kontaktformulierungen in Gestalt zusätzlicher Interfacevariablen und deren im Allgemeinen einhergehenden unvorteilhaften Sattelpunktstrukturen vermeidet. Obwohl es sich bei der Nitsche-Methode um eine reine verschiebungsbezogene Formulierung handelt, ist sie im Kontrast zur Penalty-Methode in der Lage die in KKT-Form vorliegenden Kontaktbedingungen exakt zu erfüllen. Allerdings hält die in dem vorliegenden Abschnitt behandelte Optimierungsmethode auch einige Nachteile parat. In Bezug auf Finite-Elemente-Implementierungen, siehe Abschnitt 5.1, ist die Auswertung des Kontaktspannungszustands im Interface an die hieran angrenzenden Kontinuumsselemente gekoppelt.²⁶ Insbesondere bei komplexen Konstitutivmodellen kann dies zu einem beachtlichen numerischen Aufwand führen. Auch prozessabhängige Zustandsvariablen, wie z. B. die inneren Variablen eines inelastischen Stoffmodells, müssen als Folge einer auf den diskretisierten Kontaktflächen ausgeführten numerischen Quadratur nun mit abgespeichert werden. Obwohl vielversprechende Umsetzungen der Nitsche-Methode im Rahmen der Methode der finiten Elemente existieren, siehe z. B. [Wriggers und Zavarise, 2007; Mlika et al., 2017; Seitz et al., 2017], wurden jedoch bislang keine Kontaktformulierungen auf Basis der Nitsche-Methode für nicht-konforme FE-Vernetzungen in Kombination mit inelastischen Konstitutivmodellen, die die Speicherung von Prozessvariablen voraussetzen, veröffentlicht. Darüber hinaus ist der Aufwand für die konsistente Linearisierung der Variation der Oberflächenspannungen²⁷ nicht zu unterschätzen, da hierdurch in der Aufstellung der Funktionalmatrix die Ableitungen zweiter Ordnung für den Spannungszustand involviert sind.

²⁶Damit sind materialabhängige Auswertungen, welche bislang nur innerhalb einer Struktur, präziser ausgedrückt in den Volumenelementen, benötigt wurden, nun auch an den facettierten Interfaceoberflächen erforderlich.

²⁷Das Pendant zu der Variation der Oberflächenspannungen in Gl. (4.102) ist δN .

5 Konsistente Raum- und Zeitdiskretisierung

Die schwache Formulierung des gekoppelten thermomechanischen Anfangs-Randwertproblems in Tab. 4.3 bzw. Tab. 4.4 kann aufgrund der komplexen Struktur der resultierenden Gleichungen im Allgemeinen nur mit Hilfe numerischer Verfahren gelöst werden. Eine in der Literatur weit verbreitete und auf zahlreiche Probleme applizierbare numerische Lösungsstrategie ist die Anwendung der sogenannten vertikalen Linienmethode (MOL) siehe [Schiesser, 1991; Großmann und Roos, 1994]. Dabei nimmt die zur Lösung der zugrunde liegenden zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungssysteme eingesetzte vertikale Linienmethode eine Trennung von räumlicher und zeitlicher Diskretisierung vor. In der vorliegenden Monographie wird im ersten Schritt, siehe Abschnitt 5.1, zunächst die Raumdiskretisierung mittels der Finite-Elemente-Methode (FEM) durchgeführt, sodass unter Beibehaltung der Zeitkontinuität Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODE-Systeme) bzw. Differential-Algebraische Gleichungssysteme (DAE-Systeme) resultieren. Zur Integration des zeit-kontinuierlichen Systems schließt sich im zweiten Schritt, siehe Abschnitt 5.2, die Diskretisierung im Zeitbereich an, welche auf ein nichtlinear algebraisches Gleichungssystem führt. Neben dem von Belytschko [1983] geprägten Begriff der Semidiskretisierung trägt die in dieser Abfolge umgesetzte sequentielle Raum-Zeitdiskretisierungstechnik auch die Bezeichnung vertikale Linienmethode.¹ Die bewusste Interpretation der klassischen Semidiskretisierungstechnik als Anwendung der vertikalen Linienmethode zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen in Ort und Zeit wurde jedoch erst durch die Arbeiten von Wittekindt [1991], Fritzen [1997], Ellsiepen [1999] und Ellsiepen und Hartmann [2001] erkennbar. Wird dagegen zuerst die Zeit und dann der Ort parametrisiert, entspricht dies der sogenannten horizontalen Linienmethode bzw. der Rothe-Methode, siehe auch [Lang, 2001; Deuffhard und Bornemann, 2008]. Eine dritte Alternative ist die simultane Diskretisierung in Raum und Zeit, z. B. mittels diskontinuierlichen Galerkin-Verfahren, die durch Hughes und Hulbert [1988] und Hulbert und Hughes [1990] als die Raum-Zeit-Finite-Elemente-Methode Einzug in die wissenschaftlichen Diskussionen erhalten hat.

In der vorliegenden Arbeit stellt der vertikale MOL-Ansatz die bevorzugte Methodik zur Lösung der in Abschnitt 4 vorgestellten Anfangs-Randwertprobleme dar. Der Abschnitt 5.1 widmet sich daher zunächst der Darstellung der Ortsdiskretisierung mit der h-Version der Finite-Elemente-Methode (FEM)² basierend auf einem isoparametrischen Elementkonzept. Aufgrund einer hohen Flexibilität bezüglich beliebiger, komplexer Geo-

¹Wenn in vielen Veröffentlichungen zu Lösungsstrategien von partiellen Differentialgleichungen von der Linienmethode die Rede ist, so ist zumeist die vertikale Linienmethode gemeint.

²Die oft benutzte Klassifizierung als h-Version der Methode der finiten Elemente (h-FEM) drückt aus, dass durch Netzverfeinerung, also Verringerung der Elementabmessungen, eine Annäherung an die

metrien und ihrer exzellenten Eignung gegenüber nichtlinearen Problemstellungen hat sich diese Standardvariante sehr erfolgreich in der Praxis bewährt. Die in Abschnitt 5.1 eingeführten Gleichungsstrukturen und Konzepte sollen innerhalb der Arbeit eine konsistente Formulierung ermöglichen, sind aber nicht als umfassende Illustration der Standard-FEM mit ihren verschiedenen Disziplinen zu verstehen. Eine gute Beschreibung dieses Raumdiskretisierungsverfahren für lineare Problemstellungen findet sich bei Becker et al. [1981], Schwarz [1984], Szabó und Babuška [1991], Hughes [2000], Bathe [2002], Betten [2003], Oñate [2013] und Zienkiewicz et al. [2013], nichtlineare Probleme werden beispielsweise in den Monographien von Strang und Fix [1973], Carey und Oden [1983], Belytschko et al. [2000], Ciarlet [2002], Betten [2004], Oden [2006], Bonet und Wood [2008], Wriggers [2008], Szabó und Babuška [2011], Borst et al. [2012], Dhatt et al. [2012], Zienkiewicz et al. [2014], Rust [2016] und Knothe und Wessels [2017] behandelt. Die Klassifizierung als h-Version drückt aus, dass der in der vorliegenden Arbeit eingesetzte h-FEM-Ansatz durch sukzessive Netzverfeinerung eine Annäherung an die exakte Lösung sowie die Approximation an eine fehlerfreie Beschreibung von gekrümmten Geometrien gewährleistet. Wie in der einschlägigen Fachliteratur nachzulesen ist, geschieht die Annäherung idealerweise mit einer algebraischen Raumkonvergenzrate. In der Standard-Finite-Elemente-Methode werden die Ansatzfunktionen zur Interpolation der Geometrie und der Primärvariablen aus Lagrange-Polynomen konstruiert. Da diese jedoch bei hohen Polynomgraden zu Oszillationen neigen, basieren die am weitesten verbreiteten Elementtypen der h-FEM-Klasse auf linearen oder quadratischen Ansatzfunktionen. Hierzu parallel haben sich höherwertige Elementformulierungen mit besseren Genauigkeits- und Konvergenzeigenschaften entwickelt, die jedoch grundlegend verschiedene Philosophien in Bezug auf die Raumdiskretisierung verfolgen. So wird beispielsweise zur Verfeinerung in der p-Version der Finite-Elemente-Methode (p-FEM), siehe [Szabó und Babuška, 1991; Szabó et al., 2004], der Polynomgrad für die Elementansatzfunktionen erhöht, während die mit einer fixierten, zumeist sehr kleinen Anzahl an finiter Elemente diskretisierte Geometrie unangetastet bleibt. Um möglichst hohe Polynomgrade mit spezifischen Eigenschaften zu realisieren, hat es sich als zweckmäßig erwiesen, hierarchische Formfunktionen auf Basis von integrierten Legendre-Polynomen zu verwenden. Wie exemplarisch Szabó et al. [2004] zeigen, weist die p-Version der Finite-Elemente-Methode bei exakter Geometrieapproximation eine exponentielle Konvergenzrate hinsichtlich des Raumdiskretisierungsfehlers auf. Für einen umfassenden Überblick zum p-FEM-Ansatz sei auf die Arbeit von Netz [2013] und die dort zitierte Literatur referiert.

Eine in jüngster Vergangenheit in der Pionierarbeit von Hughes et al. [2005] vorgestellte geometrieorientierte Raumdiskretisierungsstrategie, die sogenannte isogeometrische Analysis, verknüpft die isoparametrische Finite-Elemente-Methode mit NURBS-basierten CAD-Methoden und vereint somit Vorteile aus beiden vorhergehend genannten Konzepten. Durch direkte Übertragung der NURBS-basierten Oberflächenbeschreibungen der Struktur aus dem CAD-Programm wird eine fehlerfreie Abbildung der Geometrie sichergestellt. Gleichzeitig eröffnet die Interpretation der B-Spline-Funktionen als spezielle Klasse von hierarchischen Ansatzfunktionen eine Interpolation der primären Feldvaria-

exakte Lösung des betrachteten Problems sowie die Approximation an eine fehlerfreie Beschreibung von gekrümmten Geometrien sichergestellt ist.

blen. Des Weiteren drückt sich die besondere Eignung der NURBS, welche die den Stand der Technik repräsentierende CAD-Technologie darstellen, in dem Verfahrensmerkmal aus, dass auf einfache Art und Weise Verfeinerungen in der Vernetzung und im Polynomgrad der NURBS-Funktionen vorgenommen werden können, ohne die zugrunde liegende Geometrie zu verändern.

Eine Besonderheit der Semidiskretisierungstechnik liegt darin begründet, dass die gesamte Vielfalt an numerischen Integrationsverfahren zum Voranschreiten im Zeitbereich zur Verfügung steht, siehe Abschnitt 5.2. Vorzugsweise werden Einschrittverfahren aus der Klasse der Runge-Kutta Verfahren und Generalized- α Methoden, die sich durch hervorragende Stabilitäts- und Genauigkeitseigenschaften auszeichnen, eingesetzt. Detaillierte Erläuterungen zu numerischen Integrationsverfahren und deren Klassifizierung in Einschritt- und Mehrschrittverfahren sowie explizite und implizite Verfahren findet der interessierte Leser z. B. in den Standardwerken von Hairer et al. [1993], Hairer und Wanner [1996] und Strehmel et al. [2012].

Im Rahmen der Behandlung von Mehrfeldproblemen, bei denen eine physikalische, wechselseitige Kopplung der Feldgrößen vorliegt, wird nach Felippa und Park [1980] prinzipiell zwischen vier grundlegenden Vorgehensweisen für die iterative Lösung der gekoppelten nichtlinear algebraischen Gleichungen unterschieden. Unter Ausschluss der eher selten anzutreffenden Feldelimination³ sollen die verbleibenden drei Lösungskonzepte in den nachfolgenden Abschnitten kurz vorgestellt werden. Eine Gegenüberstellung der Eigenschaften der Ansätze findet sich beispielsweise in [Lübbing, 1997; Mok, 2001; Erbts et al., 2012]. Im Rahmen des in der vorliegenden Monographie behandelten thermomechanischen Anfangs-Randwertproblems sei zu vergleichenden Untersuchungen der verschiedenen Ansätze für die finite Thermoelastizität auf [Miehe, 1988; Reese und Govindjee, 1998b] und für die finite Thermoviskoelastizität auf [Reese, 2001] referiert.

Monolithische Lösungsstrategie Für den Fall der monolithischen Lösungsprozedur wird das voll gekoppelte nichtlineare algebraische Gleichungssystem simultan nach allen Unbekannten der beteiligten Felder in jedem Zeitschritt gelöst. Der monolithische Ansatz erfordert im Rahmen einer konsistenten Linearisierung,⁴ siehe auch [Wriggers, 1988], die Berechnung aller Koppelterme in der Funktionalmatrix, sodass ein unsymmetrisches Gesamtgleichungssystem (lineares Gleichungssystem (LGS)) hervorgeht. Der Vorteil überlegender Stabilitäts- und Konvergenzeigenschaften⁵ wird damit durch den Nachteil eines erhöhten Rechenaufwands, der aus dem Aufstellen der Ableitungen sowie der Lösung eines großen unsymmetrischen LGS resultiert, erkauft. Ein weiteres Defizit resultiert abhängig vom jeweiligen betrachteten Problem aus den unter Umständen beträchtlich um Größenordnungen differierenden Koeffizienten in den Systemgleichungen, welche

³Um die Anzahl der Feldvariablen und die Problemdimension zu reduzieren wird bei dieser Vorgehensweise eine Feldgleichung in die andere eingesetzt.

⁴Der von Simo und Taylor [1985] geprägte Fachausdruck der konsistenten Linearisierung bezeichnet das konsistente und korrekte Bilden der Ableitungen für die zeitdiskretisierten Systemgleichungen. Die konsistente Linearisierung ist notwendig zum Erreichen der quadratischen Konvergenz des in einer impliziten Finite-Elemente-Formulierung auftretenden globalen Newton-Raphson-Verfahrens.

⁵Monolithische Algorithmen, die auf einem impliziten Zeitintegrationsverfahren aufbauen, sind unbedingt stabil.

sich negativ auf die Kondition des LGS auswirken. Abhilfe kann hier allerdings eine feldspezifische Skalierung schaffen. Dennoch ist für stark gekoppelte Mehrfeldprobleme die simultane Lösungsstrategie aufgrund ihrer natürlichen Stabilität und Robustheit, siehe z. B. [Lübbing, 1997; Reese, 2001; Ibrahimbegovic et al., 2001], den im nächsten Paragraphen beschriebenen partitionierten Lösungsstrategien vorzuziehen. Infolgedessen sowie hinsichtlich der Ausnutzung von Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung und adaptiven Strategien zur Steuerung der Zeitschrittweite wird in der vorliegenden Arbeit zur Behandlung des thermomechanisch gekoppelten Mehrfeldproblems die simultane Vorgehensweise eingesetzt. Diverse Beschleunigungstechniken, um die Effizienz der iterativen Berechnungsmethodik zu steigern, sind Gegenstand der Untersuchungen in [Quint, 2012]. Auch von Glaser [1991], Parisch [2003] und Fritsch [2004] wird ein monolithischer FEM-Ansatz zur Behandlung von Problemstellungen der finiten Plastizität gekoppelt mit einer linearen Wärmeleitung angewendet. Die dort behandelten zeitkontinuierlichen Systemgleichungen werden durch eine Kombination aus einem impliziten Euler-Verfahren und dem klassischen Prädiktor-Korrektor-Verfahren aufgelöst. Reese und Govindjee [1998b] wenden die simultane Lösungsmethodik zur thermomechanischen Beschreibung elastomerartiger Polymerwerkstoffe an. In [Reese, 2001] findet eine Erweiterung auf thermoviskoelastisches Materialverhalten statt. Weitere starke Prägungen hat die monolithische Lösungsstrategie durch die Arbeiten von Hartmann et al. [2009b], Hamkar und Hartmann [2012], Quint [2012], Hartmann und Netz [2013], Hamkar [2013], Netz [2013], Hartmann et al. [2013], Al-Kinani [2014], Netz und Hartmann [2015], Rothe et al. [2015b], Rothe und Hartmann [2015], Rothe [2015], Erbts et al. [2015], Rothe et al. [2015a], Gleim et al. [2015], Grafenhorst et al. [2016], Grafenhorst et al. [2017] und Martinez Page et al. [2017] erfahren.

Partitionierte und gestaffelte Lösungsstrategie Nach der von Felippa et al. [2001] angegebenen Definition bezeichnet eine Partitionierung eine Zerlegung des räumlichen Rechengebietes, also der räumlichen Diskretisierung, in einzelne miteinander interagierende Teilgebiete oder Partitionen. Die Partitionen werden numerisch vollständig getrennt, als isolierte Recheneinheiten, behandelt. Mit der Begründung, dass sich die vorliegende Monographie mit der Behandlung von Mehrfeldproblemen beschäftigt, werden im Folgenden die Termini Partition und physikalisches Feld gleichgesetzt.⁶ Die Übermittlung von Interaktions- oder Kopplungseffekten zwischen den individuellen Komponenten, welche von dem jeweiligen Teilgebiet als forcierende Lasten wahrgenommen werden, geschieht mittels Prädiktor-, Substitutions-, oder Synchronisationstechniken.⁷ Abhängig von der räumlichen Parametrisierung,⁸ einer Differenzierung nach der Art der in den Teilgebieten

⁶Es sei darauf hingewiesen, dass neben der Deklaration eines physikalischen Feldes als isolierte Recheneinheit eine Partition auch eine radikal andere Definition zugewiesen bekommen kann. In [Park, 1980; Park und Felippa, 1980; Park und Felippa, 1983] entsprechen die isolierten Recheneinheiten räumlich getrennten Teilgebieten einer Struktur, die durch einen gemeinsamen Rand bzw. gemeinsames Interface miteinander verbunden sind.

⁷In der Regel finden Interaktions- oder Kopplungseffekte in Form einer sogenannten Lastvektorkopplung, also einem Datenaustausch in Gestalt wechselseitig übergebener Lastgrößen, Berücksichtigung, siehe [Lübbing, 1997].

⁸Aus der Raumdiskretisierung können überlappende oder nicht überlappende Partitionierungen hervorgehen.

verwendeten Zeitintegrationsverfahren, der Reihenfolge von Raum- und Zeitdiskretisierung sowie der eingesetzten expliziten oder impliziten Kopplungsstrategie können eine Vielzahl von Partitionierungskonzepten unterschieden werden. Einen anschaulichen Überblick hierzu ist z. B. [Mok, 2001] zu entnehmen.

Bei einer klassisch partitionierten Vorgehensweise werden die gekoppelten Felder in jedem Zeitinkrement unabhängig voneinander parallel behandelt. Die unbekannten Primärvariablen werden in einem entkoppelten Iterationsprozess berechnet, wobei für die jeweils anderen Teilfelder ein optimaler Prädiktorwert aus den vorangegangenen Inkrementen herangezogen wird. Die Kopplung der Felder ist erst im nächsten Inkrement wirksam. Neben anderen Ansätzen wird die klassisch partitionierte Berechnungsstrategie in [Park, 1980; Park und Felippa, 1980; Park und Felippa, 1983; Felippa et al., 2001] diskutiert.

Im Rahmen der partitionierten Behandlung von multiphysikalisch gekoppelten Systemen haben sich jedoch sehr erfolgreich sogenannte iterativ gestaffelte, stark koppelnde, implizite Verfahren, deren Fokus auf Robustheit und Stabilität liegt, etabliert, siehe u. a. [Felippa und Park, 1980; Park und Felippa, 1983; Lewis und Schrefler, 1987; Miehe, 1988; Felippa et al., 2001]. Die Sequenz der in einer spezifischen Reihenfolge angeordneten Teilprobleme wird solange iterativ durchlaufen bis die individuellen physikalischen Felder ausbalanciert sind, d. h. nahe dem Gleichgewicht sind, und das geforderte Konvergenzkriterium erfüllen.⁹ Falls Konvergenz erreicht wird, stellt der in Gestalt der durchlaufenen Gleichgewichtsiterationen zusätzlich implizierte numerische Aufwand sicher, dass die Lösung gegen die der monolithischen Berechnungsstrategie konvergiert. Die Vererbung der Stabilitäts- und Genauigkeitseigenschaften ist jedoch nicht a priori gesichert, sondern hängt von verschiedenen Berechnungsparametern, wie z. B. Netzweite, Zeitschritt und Polynomgrad der Ansatzfunktionen ab, siehe hierzu auch [Turska und Schrefler, 1993]. Zur Sicherung und effizienten Beschleunigung der Konvergenz sind daher robuste Maßnahmen erforderlich. Erbts und Düster [2012], Erbts et al. [2015] und Rothe et al. [2015a] plädieren zur Beseitigung dieser Stabilitätsprobleme für den Einsatz von dynamischen Relaxationsschemata, siehe auch [Joosten et al., 2009], sowie von Quasi-Newton-Methoden. Bei einem schwach gekoppelten Mehrfeldproblem reicht die Anwendung einer einfach gestaffelten Lösungsstrategie aus. Hierbei wird angenommen, dass bereits nach einem einzigen sequentiellen Berechnungsdurchlauf der Teilprobleme Konvergenz erreicht ist. Darüber hinaus lässt sich im Gegensatz zur monolithischen Lösungsstrategie durch das Herunterbrechen in isolierte Teilprobleme das Aufstellen nicht symmetrischer Funktionalmatrizen vermeiden.

Mit Blick auf die Historie wurden zunächst Lösungsstrategien und Algorithmen für Einfeldprobleme entwickelt. Dieser Umstand leitet sich von einem wesentlichen Vorteil der partitionierten bzw. gestaffelten Lösungsstrategien gegenüber der simultanen Vorgehensweise ab. Erstere gestatten in Gestalt einer einfachen Kombinierbar- und Adaptierbarkeit verschiedene Berechnungswerkzeuge oder PDE-Löser zur Behandlung der jeweiligen

⁹Die Bezeichnung „gestaffelt“ entspringt dem in einem temporalen Flussdiagramm visualisierten zickzack-förmigen Berechnungsablauf für die gestaffelte Lösungsstrategie, siehe [Felippa und Park, 1980]. Konzeptionell lässt sich die in der englischsprachigen Literatur als „staggered solution procedure“ bezeichnete partitionierte Lösungsstrategie in Form einer sich wiederholenden sequentiellen Ausführung von Einfeldberechnungen interpretieren.

physikalischen Feldgleichung einzusetzen. Neben der durch Softwaremodularität und Code-Wiederverwendbarkeit erzeugten Flexibilität tragen die markanten Merkmale, wie unterschiedliche, an die jeweilige Feldgleichung angepasste Zeitschrittweiten sowie differierende Netze für die einzelnen Felder zu verwenden, zu einer hohen Anpassungsfähigkeit bei. Beispielsweise werden in [Erbts et al., 2013; Erbts et al., 2015; Rothe et al., 2015a] zur partitionierten Behandlung thermo-elektrisch-mechanischer Problemstellungen bei nicht-konformen räumlichen Diskretisierungen der beteiligten Felder spezifische Interpolationskonzepte, die die für das Unterproblem berechneten Primärvariablen des Quellnetzes auf das Zielnetz projizieren, herangezogen. Auch Rieger [2002] sowie Rieger und Wriggers [2004] setzten im Rahmen von raumadaptiven Methoden zur Berechnung von thermo-mechanisch gekoppelten Kontaktproblemen auf solch eine unabhängige, inhomogene Gebietsdiskretisierung für das Temperatur- und Verschiebungsfeld. Als weiterführende Arbeiten, in denen gestaffelte Lösungsalgorithmen in Verbindung mit thermomechanischen Fragestellungen umgesetzt wurden, sind exemplarisch Argyris et al. [1981], Argyris und Doltsinis [1981], Doltsinis [1990], Simo und Miehe [1992], Armero und Simo [1992], Wriggers et al. [1992], Armero und Simo [1993], Miehe [1995b], Miehe [1995a], Oancea und Laursen [1997], Adam und Ponthot [2002a], Adam und Ponthot [2002b], Adam und Ponthot [2005], Erbts und Düster [2012], Erbts et al. [2015], Rothe et al. [2015a] und Martins et al. [2017] anzuführen. Eine zentrale Thematik, die u. a. in diesen Aufsätzen behandelt wird, ist die Art und Wahl der Partitionierung der Felder, der sogenannte „Operator-Split“. Armero und Simo [1992] und Armero und Simo [1993] zeigen, dass unbedingte Stabilität nur mit einem isotropen Operator-Split erreicht wird. Dagegen setzen beispielsweise [Argyris et al., 1981; Argyris und Doltsinis, 1981; Doltsinis, 1990; Simo und Miehe, 1992; Wriggers et al., 1992; Oancea und Laursen, 1997; Adam und Ponthot, 2002a; Adam und Ponthot, 2002b; Adam und Ponthot, 2005; Erbts und Düster, 2012; Erbts et al., 2015] einen isothermischen „Operator-Split“ ein. Ohne den Einsatz zusätzlicher Stabilisationstechniken bleibt jedoch die Restriktion der bedingten Stabilität bestehen.

Weite Verbreitung hat die gestaffelte Lösungsstrategie aufgrund der unkomplizierten Kopplung von einem Fluid- und Festkörperlöser ebenfalls im Bereich der Fluid-Struktur-Interaktion erlangt, siehe z. B. [Felippa et al., 2001; Stenel et al., 2008; Küttler, 2009; Hartmann et al., 2009c; Birken et al., 2010; Birken et al., 2015]. Da klassische monolithische Berechnungsstrategien auf konformen Interfacediskretisierungen aufbauen, eignen sie sich prinzipiell nicht zur Berechnung von Fluid-Struktur-Kopplungen mit nicht-konformen Schnittstellen. Wie Popp [2012] zeigt, kann allerdings hier die in Abschnitt 5.5 vorgestellte Mortar-Methode Abhilfe schaffen.

Anmerkung 1 *Die bewusste Interpretation der klassischen Semidiskretisierungstechnik als Anwendung der vertikalen Linienmethode zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen in Ort und Zeit geht zurück auf die Arbeiten von Wittekindt [1991], Fritzen [1997] und Ellsiepen [1999] und Ellsiepen und Hartmann, 2001. In diesen Aufsätzen wird das raumdiskretisierte Prinzip der virtuellen Verschiebungen (PvV) zusammen mit den gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung für die inneren Variablen, die die Evolution des inelastischen Materialverhaltens lokal an jedem Gauß-Punkt der Struktur beschreiben, als DAE-System identifiziert. Im Rahmen isothermer Betrachtungen demons-*

trieren Ellsiepen und Hartmann [2001] die Gleichwertigkeit zwischen der Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens (BE) auf das DAE-System in Kombination mit dem Multilevel-Newton-Verfahren (MLNA)¹⁰ zur Lösung des resultierenden gekoppelten nichtlinearen Gleichungssystems und der klassischen Finite-Elemente-Philosophie, d. h. der direkten Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens auf Gauß-Punktebene kombiniert mit der von Simo und Taylor [1985] geprägten Vorgehensweise zur konsistenten Linearisierung.¹¹ Es ist hervorzuheben, dass das Applizieren des reinen Newton-Raphson-Verfahrens in der vielfach zitierten Pionierarbeit von Simo und Taylor [1985] zur konsistenten Linearisierung nicht auf die häufig propagierte iterative Lösung auf Gauß-Punktebene, den sogenannten Spannungsalgorithmus, führt, siehe hierzu auch [Hartmann, 2004; Hartmann, 2005]. Erst nach genauerer Betrachtung des Originalartikels wird offensichtlich, dass der Satz über implizite Funktionen Anwendung findet. Das eigentlich angewendete numerische Verfahren zur Lösung des in Abhängigkeit von inneren Variablen und Verschiebungsfreiheitsgraden gekoppelten nichtlinearen Gleichungssystems stellt das sogenannte Multilevel-Newton-Verfahren (MLNA) dar, siehe [Rabbat et al., 1979; Hoyer und Schmidt, 1984; Schmidt et al., 1985]. Auf Basis dieser in [Wittekindt, 1991; Fritzen, 1997; Ellsiepen, 1999; Ellsiepen und Hartmann, 2001] gezogenen Schlussfolgerungen konnte die klassische Vorgehensweise erstmals mit konkreten Verfahren der numerischen Mathematik in Verbindung gebracht werden. Mit den Einblicken, die diese globale DAE-Interpretation eröffnet, wird die Grundlage geschaffen, effizientere numerische Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung anzuwenden und damit neue Finite-Elemente-Schemata zu entwickeln. Im Rahmen von quasistatischen Problemstellungen der Strukturmechanik wurden in den Aufsätzen von Hartmann [1999], Hartmann [2001a], Ellsiepen und Hartmann [2001], Hartmann [2000], Hartmann [2002], Hartmann [2003], Hartmann [2005], Hartmann [2006b], Hartmann und Bier [2007], Quint und Hartmann [2007], Quint et al. [2008], Hartmann et al. [2008a], Hartmann und Bier [2008], Hartmann et al. [2008b], Hartmann et al. [2009a], Rothe et al. [2011], Rothe et al. [2012], Krämer et al. [2013], Squazzo et al. [2014] und Grafenhorst et al. [2014] diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren (DIRK) untersucht, deren Charakteristika sich in überzeugenden Resultaten hinsichtlich Effizienz, Robustheit und Genauigkeit manifestieren. Im Bereich der Strukturdynamik seien die Arbeiten von Grafenhorst et al. [2016] und Grafenhorst et al. [2017] erwähnt. Die Übertragung des monolithischen DIRK/MLNA-Ansatzes auf gekoppelte Mehrfeldprobleme wurde in [Hartmann et al., 2009b; Quint, 2012; Hartmann et al., 2013; Al-Kinani, 2014; Rothe et al., 2015b; Rothe et al., 2015a; Rothe, 2015] umgesetzt. Thermisch motivierte Transportvorgänge, deren Lösungscharakter sich grundlegend von mechanischen Systemen unterscheiden, sind Gegenstand der Untersuchungen in [Quint et al., 2011; Carstens und Kuhl, 2012]. Die letzte Autorengruppe zieht dabei im Rahmen hochgenauer Diskretisierungen im Raum zusätzliche Vergleiche zu anderen Zeitintegrationsklassen. Zudem können aufgrund der algorithmischen Struktur der diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren bestehende, auf dem klassischen Ansatz basierende Finite-Elemente-Programme problem-

¹⁰BE/MLNA ist ein Lösungsansatz basierend auf dem impliziten Euler-Verfahren (BE) in Kombination mit dem Multilevel-Newton-Verfahren (MLNA).

¹¹Die konsistente Linearisierung, das konsistente und korrekte Bilden der Ableitungen für die zeitdiskretisierten Systemgleichungen, ist notwendig zum Erreichen der quadratischen Konvergenz des in einer impliziten Finite-Elemente-Formulierung auftretenden globalen Newton-Raphson-Verfahrens.

los um solche Integrationsschemata höherer Ordnung erweitert werden. Ein weiteres Leistungsmerkmal, welches sich ohne nennenswerte Mehrkosten in das DIRK/MLNA-Konzept einfügt, ist die Integration einer effizienten automatischen Schrittweitenkontrolle. Eine vollständig iterationsfreie Lösungsprozedur innerhalb des Finite-Elemente-Kontextes wurde in den Arbeiten von Hartmann und Wensch [2007], Hamkar und Hartmann [2008], Hartmann und Hamkar [2010], Netz et al. [2011], Hamkar et al. [2012], Hamkar und Hartmann [2012] und Hamkar [2013] durch die Anwendung von linear-impliziten Runge-Kutta Verfahren (**LIRK**), mit Fokus auf die sogenannten Rosenbrock-Verfahren der LIRK-Klasse, realisiert. Der offensichtlich auf der Hand liegende Vorteil, dass keine gekoppelten nichtlinearen algebraischen Gleichungssysteme, weder global noch lokal auf Gauß-Punktebene, resultieren, sondern nur lineare Gleichungssysteme behandelt werden müssen, führt zu einer beachtenswerten Reduktion des Rechenaufwands. Für vergleichende Studien zu unterschiedlichen Zeitintegrationsklassen, u. a. zu DIRK-, Rosenbrock- sowie Generalized- α -Verfahren, sei auf [Rothe et al., 2012; Grafenhorst et al., 2017] referiert. Verknüpfungen aus Elementformulierungen und Zeitintegration höherer Ordnung wurden beispielsweise in den Aufsätzen von Heisserer et al. [2007], Heisserer et al. [2008], Netz et al. [2011], Hartmann und Netz [2013], Netz [2013] und Netz und Hartmann [2015] umgesetzt.

5.1 Raumdiskretisierung mittels der Finite-Elemente-Methode

Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode wird der materielle Körper \mathcal{B} in eine diskrete Version \mathcal{B}^h , bestehend aus n^e nicht überlappenden Untergebieten zerlegt, siehe Abb. 5.1. Die Subgebiete, welche die Bezeichnung finite Elemente tragen, approximieren die Vo-

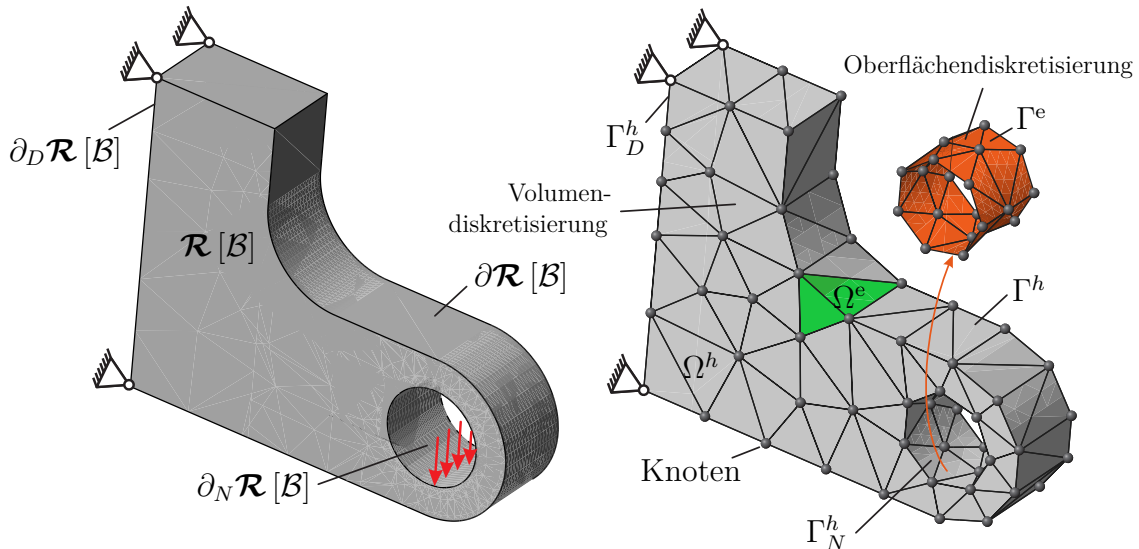


Abbildung 5.1: FEM-Raumdiskretisierung: Volumen- und Oberflächenvernetzung

lumenregion und die Berandung in der Referenz- und Momentankonfiguration durch

formale Verknüpfungsoperationen

$$\mathcal{R}[\mathcal{B}] \approx \Omega^h = \bigcup_{e=1}^{n^e} \Omega^e, \quad \partial \mathcal{R}[\mathcal{B}] \approx \Gamma^h = \bigcup_{e=1}^{n^e} \Gamma^e, \quad (5.1)$$

$$\chi_t[\mathcal{B}] \approx \omega^h = \bigcup_{e=1}^{n^e} \omega^e, \quad \partial \chi_t[\mathcal{B}] \approx \gamma^h = \bigcup_{e=1}^{n^e} \gamma^e. \quad (5.2)$$

Der hochgestellte Index $(\cdot)^h$ soll in den nachfolgenden Abschnitten eine räumlich diskretisierte Größe kennzeichnen. Aufgrund der weiterhin gültigen Kontinuität von \mathcal{B}^h sind Durchdringungen und Lücken zwischen den finiten Elementen nicht erlaubt, sodass Linien- bzw. Flächenbegrenzungen benachbarter Elemente zusammenfallen. Die n^n diskreten Punkte der vernetzten Struktur in Abb. 5.1 kennzeichnen sogenannte Knoten auf der Berandung eines finiten Elements. Innerhalb einer globalen Betrachtung sind sie ebenfalls verschiedenen benachbarten Untergebieten zuzuordnen. Abb. B.1 im Anhang B.1 zeigt typische Elementformen in 2D und 3D wie sie in der vorliegenden Arbeit Anwendung finden. Die folgenden Ausführungen beschreiben jedoch im Rahmen der geometrisch nichtlinearen Theorie nur eine Raumdiskretisierung im dreidimensionalen Raum. Für die konzeptionell identische Illustration der Gebietsdiskretisierung in 1D und 2D sei auf einschlägige Finite-Elemente-Fachliteratur referiert. Sofern nichts anderes vereinbart wird, beziehen sich sämtliche Komponentendarstellungen von Vektoren und Matrizen auf ein kartesisches Koordinatensystem mit orthonormalen Basisvektoren $\mathbf{e}_1 = \{1, 0, 0\}^T \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{e}_2 = \{0, 1, 0\}^T \in \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{e}_3 = \{0, 0, 1\}^T \in \mathbb{R}^3$. Die Ortsvektoren in der Referenz- und Momentankonfiguration besitzen damit beispielsweise die Komponentendarstellung

$$\mathbf{X} = X \mathbf{e}_1 + Y \mathbf{e}_2 + Z \mathbf{e}_3 \quad \text{und} \quad \mathbf{x} = x \mathbf{e}_1 + y \mathbf{e}_2 + z \mathbf{e}_3 \quad (5.3)$$

bzw. erhalten als Spaltenvektor die Gestalt

$$\mathbf{X} = \{X, Y, Z\}^T \in \mathbb{R}^3 \quad \text{und} \quad \mathbf{x} = \{x, y, z\}^T \in \mathbb{R}^3. \quad (5.4)$$

Im Kontext eines isoparametrischen Elementkonzepts werden im Gebiet des finiten Elements sowohl die Geometrie als auch die Feldvariablen durch dieselben skalaren Ansatzfunktionen interpoliert. Die Approximationen für das primäre und virtuelle Verschiebungsfeld in räumlicher Darstellung, $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t) = \{u^h(\mathbf{x}^h, t), v^h(\mathbf{x}^h, t), w^h(\mathbf{x}^h, t)\}^T \in \mathbb{R}^3$ und $\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h) = \{\delta u^h(\mathbf{x}^h), \delta v^h(\mathbf{x}^h), \delta w^h(\mathbf{x}^h)\}^T \in \mathbb{R}^3$, ausgedrückt mittels einer Linearkombination aus Ansatzfunktion $N_j(\mathbf{x}^h)$ für den globalen Knoten $j = 1, \dots, n^n$ und diskreter Größe $\mathbf{u}_j = \{u_j, v_j, w_j\}^T \in \mathbb{R}^3$ bzw. $\delta \mathbf{u}_j = \{\delta u_j, \delta v_j, \delta w_j\}^T \in \mathbb{R}^3$, lauten:¹²

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \approx \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t) = \sum_{j=1}^{n^n} N_j(\mathbf{x}^h) \mathbf{u}_j(t), \quad (5.5)$$

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) \approx \delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h) = \sum_{j=1}^{n^n} N_j(\mathbf{x}^h) \delta \mathbf{u}_j \quad (5.6)$$

¹²Die zu diskretisierenden Größen bzw. Gleichungen können ebenfalls mit materiellen Koordinaten $\mathbf{X}^h \in \mathbb{R}^3$ formuliert werden. In Bezug auf das Verschiebungsfeld \mathbf{u}^h ergibt sich in materieller Darstellung dann der Ausdruck $\hat{\mathbf{u}}^h(\mathbf{X}^h, t) = \mathbf{u}^h(\chi_R^h(\mathbf{X}^h, t), t)$, mit $\mathbf{x}^h = \chi_R^h(\mathbf{X}^h, t)$.

Hierbei bezeichnen $\mathbf{u}_j(t) \in \mathbb{R}^3$ die Knotenverschiebungen und $\delta \mathbf{u}_j \in \mathbb{R}^3$ die virtuellen Knotenverschiebungen am globalen Knoten $j = 1, \dots, n^n$. Bei genauerer Betrachtung der Gleichungen (5.5) und (5.6) wird ersichtlich, dass die Finite-Elemente-Methode Restriktionen an den Lösungs- und Gewichtsraum, $\mathcal{S}_{u,t}$ und \mathcal{V}_u , impliziert und diese durch endlichdimensionale Näherungen,

$$\mathcal{S}_{u,t}^h \subset \mathcal{S}_{u,t} \quad \text{und} \quad \mathcal{V}_u^h \subset \mathcal{V}_u, \quad (5.7)$$

ersetzt. Die Wahl identischer Interpolationsfunktionen für $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t)$ und $\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h)$ geht auf einen Ansatz nach Bubnov-Galerkin zurück, siehe z. B. [Fairweather, 1978]. Darüber hinaus werden die in der Definition des Unterraums $\mathcal{S}_{u,t}^h$ eingebetteten und in Gl. (5.5) enthaltenen Verschiebungsrandbedingungen

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \approx \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t) = \bar{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t) \quad \forall \mathbf{x} \in \partial_u \chi_t[\mathcal{B}] \wedge \mathbf{x}^h \in \gamma_u^h, \quad (5.8)$$

siehe auch Gl. (4.7), infolge der knotenweise Interpolation mit einer begrenzten Anzahl von linear unabhängigen Ansatzfunktionen und der noch zu spezifizierenden Geometriediskretisierung nur näherungsweise wiedergegeben.¹³ Äquivalente Aussagen gelten auch für die homogenen Randbedingungen der virtuellen Verschiebungen.

Die Analyse der Berechnungsvorschriften (5.5) und (5.6) in Abhängigkeit der diskretisierten, globalen Koordinate $\mathbf{x}^h \in \mathbb{R}^3$ offenbart noch keinen elementbezogenen Zusammenhang. Hierzu ist es zunächst notwendig, die formalen Transformationsabbildungen

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^h &= \{X^h, Y^h, Z^h\}^T = \chi_R^e(\boldsymbol{\xi}) \Leftrightarrow \boldsymbol{\xi} = \phi_R^e(\mathbf{X}^h), \\ \mathbf{x}^h &= \{x^h, y^h, z^h\}^T = \chi_t^e(\boldsymbol{\xi}) \Leftrightarrow \boldsymbol{\xi} = \phi_t^e(\mathbf{x}^h), \end{aligned} \quad (5.9)$$

mit den inversen Zuordnungsabbildungen $\phi_R^e = \chi_R^{e-1}$ und $\phi_t^e = \chi_t^{e-1}$, einzuführen, welche eine Verbindung zwischen dem Elementgebiet in der Referenz- bzw. Momentankonfiguration Ω^e bzw. ω^e und dem normierten Referenzelement Ω_\square herstellen, siehe Abb. 5.2. Die Koordinatentransformationen gestatten es die zu diskretisierenden Gleichungen in den Parameterraum des Elements zu überführen. Für ein dreidimensionales Hexaeder Element mit n_{en} Knoten sind exemplarisch die lokalen Koordinaten $\boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta, \zeta\}^T$ im Parameterraum Ω_\square in den Grenzen $\xi \in [-1, 1]$, $\eta \in [-1, 1]$ und $\zeta \in [-1, 1]$ definiert. Die Anzahl der einem Element zugeordneten Knoten wird im Folgenden durch n_{en} festgelegt. Für die auf Ω_\square erklärten Formfunktionen $N_a(\boldsymbol{\xi})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, werden zumeist Lagrange-Polynome mit niedriger Ordnung gewählt. Die Bezeichnungen lineares bzw. quadratisches Element sind dabei an die verwendete Interpolationsordnung für $N_a(\boldsymbol{\xi})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, geknüpft. Die Polynome erfüllen außerdem unter anderem die Eigenschaft

$$N_a(\boldsymbol{\xi}_b) = \delta_{ab}, \quad \text{mit} \quad \delta_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad \boldsymbol{\xi}_a = \boldsymbol{\xi}_b, \\ 0 & \text{für} \quad \boldsymbol{\xi}_a \neq \boldsymbol{\xi}_b, \end{cases} \quad (5.10)$$

d. h. dass die Ansatzfunktion $N_a(\boldsymbol{\xi})$ lediglich am lokalen Knoten $a = b$ den Wert 1 annimmt und an allen anderen Knoten des Elements, also $a \neq b$, den Funktionswert 0

¹³In der klassischen FEM basierend auf der Bubnov-Galerkin Methode werden üblicherweise die Dirichlet-Randbedingungen durch vorgegebene Feldgrößen an den Knoten interpoliert, siehe hierzu auch die nachfolgende Partitionierung in unbekannte und bekannte Knotengrößen.

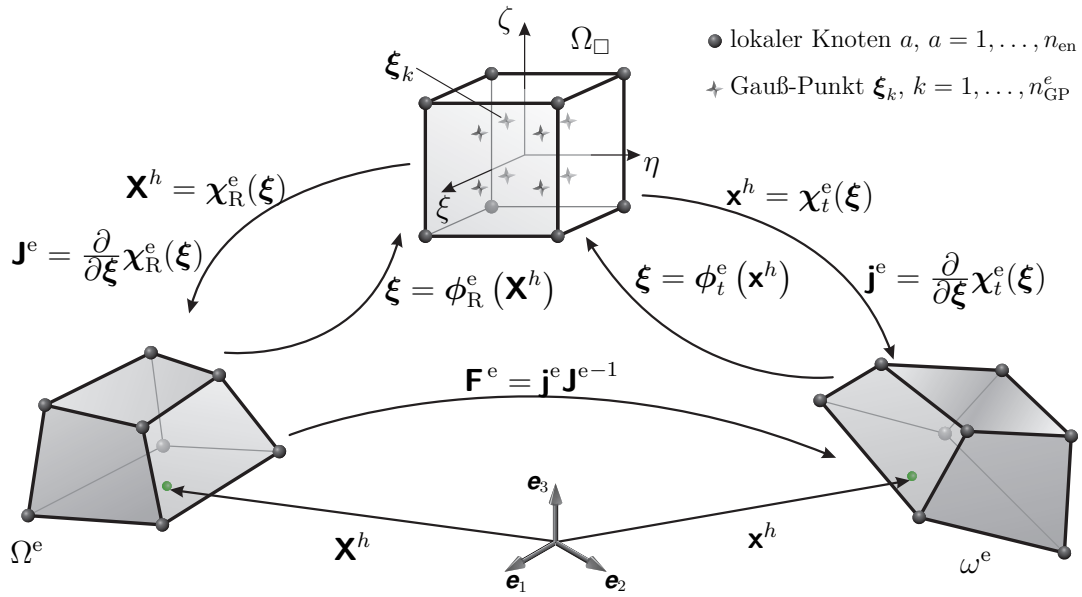


Abbildung 5.2: Exemplarische Darstellung der isoparametrischen Transformationsvorschriften und deren Jacobi-Matrizen für ein lineares Hexaeder-Element (Hex8) e , modifiziert übernommen von Rothe [2015]

aufweist. Darüber hinaus werden an die Formfunktionen weitere Anforderungen, wie z. B. die Vollständigkeit des Polynoms sowie bestimmte Steigkeits- und Differenzierbarkeitsanforderungen gestellt. Weitere Details zur Konstruktion und den Eigenschaften der Ansatzfunktionen sind in [Hughes, 2000; Wriggers, 2008; Schwarz und Köckler, 2011] sowie in Anhang B.1 zu finden. Eine vollständige Auflistung der in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden Formfunktionen für die in Abb. B.1 aufgeführten Elementformen ist Tab. B.1 zu entnehmen.

Aufgrund des isoparametrischen Elementkonzepts werden identische Ansatzfunktionen zur Geometriediskretisierung von Referenz- und Momentankonfiguration verwendet. Die kontinuierlichen Abbildungen χ_R^e und χ_t^e , siehe Gl. (5.9), für ein Element mit dem Index e , $e = 1, \dots, n^e$, stellen sich daher in der expliziten Gestalt

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^h &= \chi_R^e(\xi) = \{\chi_{RX}^e(\xi), \chi_{RY}^e(\xi), \chi_{RZ}^e(\xi)\}^T = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a(\xi) \mathbf{x}_a^e, \\ \mathbf{x}^h &= \chi_t^e(\xi) = \{\chi_{tx}^e(\xi), \chi_{ty}^e(\xi), \chi_{tz}^e(\xi)\}^T = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a(\xi) \mathbf{x}_a^e, \end{aligned} \quad (5.11)$$

mit den lokalen Knotenortsvektoren $\mathbf{X}_a^e = \{X_a^e, Y_a^e, Z_a^e\}^T \in \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{x}_a^e = \{x_a^e, y_a^e, z_a^e\}^T = \mathbf{X}_a^e + \mathbf{u}_a^e \in \mathbb{R}^3$ sowie den weiter unten eingeführten lokalen Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_a^e \in \mathbb{R}^3$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, dar. Verständlicherweise können beliebig gekrümmte Berandungen der Strukturen durch Gl. (5.11) nicht exakt wiedergegeben werden. Die Gradienten der

Koordinatentransformationen, die sogenannten Jacobi-Matrizen, sind definiert als

$$\mathbf{J}^e = \text{Grad}_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}_R^e(\boldsymbol{\xi}) = \frac{d}{d\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}_R^e(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} \mathbf{x}_a^e \begin{Bmatrix} N_{a,\xi} \\ N_{a,\eta} \\ N_{a,\zeta} \end{Bmatrix}^T, \quad (5.12)$$

$$\mathbf{j}^e = \text{Grad}_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}_t^e(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}_t^e(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} \mathbf{x}_a^e \begin{Bmatrix} N_{a,\xi} \\ N_{a,\eta} \\ N_{a,\zeta} \end{Bmatrix}^T. \quad (5.13)$$

Aufgrund der postulierten Invertierbarkeit von $\boldsymbol{\chi}_R^e(\boldsymbol{\xi})$ und $\boldsymbol{\chi}_t^e(\boldsymbol{\xi})$, der aus Abb. 5.2 abgeleiteten kinematischen Beziehungen

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{j}^e \mathbf{J}^{e-1}, \quad \det \mathbf{F}^e = \frac{\det \mathbf{j}^e}{\det \mathbf{J}^e} \quad (5.14)$$

für den auf das Element e , $e = 1, \dots, n^e$, bezogenen Deformationsgradienten $\mathbf{F}^e \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ sowie $\det \mathbf{F}^e > 0$ gilt $\det \mathbf{J}^e > 0$ und $\det \mathbf{j}^e > 0$.

Die isoparametrische Transformation (5.11)₂ induziert die Übereinstimmung der globalen Approximationen (5.5) und (5.6) mit den lokal im Element, d. h. $\mathbf{x}^h \in \omega^e$, definierten Verschiebungsfeldern $\hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h, t) = \{\hat{u}^e(\mathbf{x}^h, t), \hat{v}^e(\mathbf{x}^h, t), \hat{w}^e(\mathbf{x}^h, t)\}^T \in \mathbb{R}^3$ und $\delta \hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h) = \{\delta \hat{u}^e(\mathbf{x}^h), \delta \hat{v}^e(\mathbf{x}^h), \delta \hat{w}^e(\mathbf{x}^h)\}^T \in \mathbb{R}^3$. Es resultieren die Äquivalenzaussagen¹⁴

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_{\text{ua}}(\mathbf{x}^h) \mathbf{u}_a(t) = \hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_{\text{u}}^e(\boldsymbol{\phi}_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{u}^e(t) \quad \text{und} \quad (5.15)$$

$$\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h) = \mathbf{N}_{\text{ua}}(\mathbf{x}^h) \delta \mathbf{u}_a = \delta \hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h) = \mathbf{N}_{\text{u}}^e(\boldsymbol{\phi}_t^e(\mathbf{x}^h)) \delta \mathbf{u}^e. \quad (5.16)$$

Abweichend von der bisher verwendeten Summennotation kommt für die weiteren Ausführungen eine Matrix-Vektor-Schreibweise zum Einsatz, bei der beispielsweise die Freiheitsgrade knotenweise in globale und lokale Vektoren angeordnet werden. Aus der Organisation der Knotengrößen \mathbf{u}_j und $\delta \mathbf{u}_j$ in dem Gesamtvektor der Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_a^T = \{\mathbf{u}_1^T, \dots, \mathbf{u}_{n^n}^T\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}}$ und dem Gesamtvektor der virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}_a^T = \{\delta \mathbf{u}_1^T, \dots, \delta \mathbf{u}_{n^n}^T\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}}$, mit $n_{\text{ua}} = 3 \times n^n$, resultiert die Matrix der Ansatzfunktionen $\mathbf{N}_{\text{ua}} = [N_1 \mathbf{I}_3 \dots N_{n^n} \mathbf{I}_3] \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{ua}}}$. Die elementbezogene Formfunktionsmatrix $\mathbf{N}_{\text{u}}^e \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{u}}^e}$ besitzt konform zu den lokalen Freiheitsgradvektoren $\mathbf{u}^{eT} = \{\mathbf{u}_1^{eT}, \dots, \mathbf{u}_{n_{\text{en}}}^{eT}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{u}}^e}$, mit $\mathbf{u}_a^e = \{u_a^e, v_a^e, w_a^e\}^T \in \mathbb{R}^3$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, und $\delta \mathbf{u}^{eT} = \{\delta \mathbf{u}_1^{eT}, \dots, \delta \mathbf{u}_{n_{\text{en}}}^{eT}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{u}}^e}$, mit $\delta \mathbf{u}_a^e = \{\delta u_a^e, \delta v_a^e, \delta w_a^e\}^T \in \mathbb{R}^3$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, den Aufbau

$$\mathbf{N}_{\text{u}}^e(\boldsymbol{\xi}) = [\mathbf{N}_{\text{u}1}^e \dots \mathbf{N}_{\text{u}n_{\text{en}}}^e], \quad \text{mit} \quad \mathbf{N}_{\text{ua}}^e(\boldsymbol{\xi}) = N_a(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{I}_3, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}. \quad (5.17)$$

Die Dimensionsgröße n_{u}^e symbolisiert die Anzahl von Verschiebungsfreiheitsgraden pro Element.¹⁵

¹⁴Mit Bezug zu den Gl. (5.15) und (5.16) sei angemerkt, dass $\mathbf{x}^h \in \mathbb{R}^3$ den globalen Ortsvektor in der Momentankonfiguration für die gesamte raumdiskretisierte Struktur symbolisiert. Demgegenüber ist $\mathbf{x}^h = \boldsymbol{\chi}_t^e(\boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{R}^3$ durch die Koordinatentransformation (5.9)₂ nur innerhalb des Elementgebiets ω^e definiert. Bei $\mathbf{x}^h = \boldsymbol{\chi}_t^e(\boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{R}^3$ handelt es sich daher um eine lokale Version des Ortsvektors in der Momentankonfiguration.

¹⁵Für die in diesen Abschnitt behandelten Volumenelemente gilt $n_{\text{u}}^e = 3 \times n_{\text{en}}$.

Die formale Partitionierung von $\mathbf{u}_a \in \mathbb{R}^{n_{ua}}$ und $\delta \mathbf{u}_a \in \mathbb{R}^{n_{ua}}$ in unbekannte und bekannte Anteile¹⁶ führt auf

$$\mathbf{u}_a(t) = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}(t) \\ \bar{\mathbf{u}}(t) \end{Bmatrix} \quad \text{und} \quad \delta \mathbf{u}_a = \begin{Bmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \delta \bar{\mathbf{u}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}. \quad (5.18)$$

Hierin entspricht $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ den unbekannten Knotenverschiebungen und $\bar{\mathbf{u}}(t) \in \mathbb{R}^{n_{up}}$ dem aus der Interpolation der Dirichlet-Randbedingungen hervorgehendem, bekannten Partitionierungsanteil, wobei die Dimensionsgrößen n_{ua} , n_{uu} und n_{up} durch den Zusammenhang $n_{ua} = n_{uu} + n_{up}$ miteinander verknüpft sind. Analog wird mit den diskreten virtuellen Größen $\delta \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\delta \bar{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^{n_{up}}$ verfahren. Gemäß der Deklaration des approximierten Gewichtsraums \mathcal{V}_u^h verschwinden jedoch die virtuellen Knotenverschiebungen, $\delta \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$.¹⁷ Die verbleibenden virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}$ sind basierend auf der Standardargumentation der Variationsrechnung beliebig. Die Zuordnung der n_u^e lokalen knotenweise angeordneten Elementverschiebungsfreiheitsgrade in $\mathbf{u}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e}$ und der virtuellen Elementknotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e}$ zu den globalen Gesamtvektoren \mathbf{u}_a und $\delta \mathbf{u}_a$ gelingt formal mittels der Koinzidenzmatrizen \mathbf{Z}_{ua}^e , $e = 1, \dots, n^e$:

$$\mathbf{u}^e = \mathbf{Z}_{ua}^e \mathbf{u}_a = \begin{bmatrix} \mathbf{Z}_u^e & \bar{\mathbf{Z}}_u^e \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \bar{\mathbf{u}} \end{Bmatrix} = \mathbf{Z}_u^e \mathbf{u} + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \bar{\mathbf{u}}, \quad \delta \mathbf{u}^e = \mathbf{Z}_{ua}^e \delta \mathbf{u}_a = \mathbf{Z}_u^e \delta \mathbf{u} \quad (5.19)$$

Infolge der Partitionierung in bekannte und unbekannte Verschiebungsfreiheitsgrade zerfällt die Zuordnungsmatrix¹⁸ $\mathbf{Z}_{ua}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{ua}}$ in die Anteile $\mathbf{Z}_u^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{uu}}$ und $\bar{\mathbf{Z}}_u^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{up}}$. Die Restrukturierung der Gleichungen (5.15) und (5.16) unter Beachtung der zuvor angegebenen Aussagen führt auf

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t) &= \hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{u}^e(t) = \mathbf{N}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{ua}^e \mathbf{u}_a(t) \\ &= \mathbf{N}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_u^e \mathbf{u}(t) + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \bar{\mathbf{u}}(t) \}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h) &= \delta \hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \delta \mathbf{u}^e = \mathbf{N}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{ua}^e \delta \mathbf{u}_a \\ &= \mathbf{N}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_u^e \delta \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

In einer analogen Verfahrensweise lässt sich das isoparametrische Elementkonzept auf die thermischen Feldvariablen anwenden. Durch Konstruktion der endlichdimensionalen Unterräume

$$\mathcal{S}_{\Theta,t}^h \subset \mathcal{S}_{\Theta,t} \quad \text{und} \quad \mathcal{V}_{\Theta}^h \subset \mathcal{V}_{\Theta} \quad (5.22)$$

¹⁶Im Folgenden werden die bekannten, vorgegebenen Größen bzw. die Anteile, welche diesen zugeordnet werden können, durch $\bar{(\cdot)}$ gekennzeichnet.

¹⁷Die knotenweise Interpolation der homogenen Randbedingungen für das diskretisierte virtuelle Verschiebungsfeld führt auf das angegebene Resultat, siehe auch Anmerkungen in Fußnote 14 aus Kapitel 4.

¹⁸Die Koinzidenzmatrizen, welche lediglich Einträge mit Nullen und Einsen enthalten, modellieren auf anschauliche Art und Weise die Zuordnung von lokalen zu globalen Freiheitsgradvektoren. Zudem gelingt es, die Assemblierungsprozedur, siehe nachfolgende Passagen, in Gestalt einer Matrix-Vektor-Notation auszudrücken. Wie Hartmann [2003] zeigt, eröffnet solch eine formalisierte Darstellung einen anschaulichen Zugang zur Finite-Elemente-Methode sowie gestattet es, neue Finite-Elemente-Schemata strukturiert zu entwickeln. Es sei jedoch hervorgehoben, dass die direkte Umsetzung der Zuordnungsmatrizen in einem Finite-Elemente-Programm nicht effizient ist. Für konkrete Anweisungen zur Implementation sei auf [Hughes, 2000; Bathe, 2002] referiert.

resultieren die folgenden globalen Ausdrücke

$$\Theta(\mathbf{x}, t) \approx \Theta^h(\mathbf{x}^h, t) = \sum_{j=1}^{n^n} N_j(\mathbf{x}^h) \Theta_j(t) = \mathbf{N}_{\Theta_a}(\mathbf{x}^h) \Theta_a(t) \in \mathcal{S}_{\Theta, t}^h, \quad (5.23)$$

$$\delta\Theta(\mathbf{x}) \approx \delta\Theta^h(\mathbf{x}^h) = \sum_{j=1}^{n^n} N_j(\mathbf{x}^h) \delta\Theta_j = \mathbf{N}_{\Theta_a}(\mathbf{x}^h) \delta\Theta_a \in \mathcal{V}_{\Theta}^h. \quad (5.24)$$

Innerhalb des Elements e für $\mathbf{x}^h \in \omega^e$ werden die Felder durch

$$\Theta^h(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_{\Theta_a}^T(\mathbf{x}^h) \Theta_a(t) = \hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \Theta^e(t), \quad (5.25)$$

$$\delta\Theta^h(\mathbf{x}^h) = \mathbf{N}_{\Theta_a}^T(\mathbf{x}^h) \delta\Theta_a = \delta\hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h) = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \delta\Theta^e \quad (5.26)$$

approximiert. In den Gleichungen (5.25) und (5.26) symbolisiert $\Theta_a^T = \{\Theta_1^T, \dots, \Theta_{n^n}^T\} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_a}}$ den Gesamtvektor der Knotentemperaturen und $\delta\Theta_a^T = \{\delta\Theta_1^T, \dots, \delta\Theta_{n^n}^T\} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_a}}$ beinhaltet sämtliche virtuelle Temperaturfreiheitsgrade der Vernetzung. Dem skalaren Feldcharakter Rechnung tragend wird $\mathbf{N}_{\Theta_a} = \{N_1, \dots, N_{n^n}\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_a}}$ auf einen Spaltenvektor reduziert. Die Übereinstimmung der globalen und lokalen, auf das Element e , $e = 1, \dots, n^e$, beschränkten Aussagen ist angesichts der Verwendung identischer Ansatzfunktionen für die Approximation der Geometrie und der Felder sichergestellt. Um für gemischte bzw. gekoppelte Feldprobleme eine monotone Konvergenz gegen die exakte Lösung zu gewährleisten, dürfen darüber hinaus die Ansatzfunktionen in \mathbf{N}_{Θ_a} nicht unabhängig zu den Interpolationsfunktionen des Verschiebungsfeldes gewählt werden, siehe hierzu [Gabbert, 1987; Altenbach et al., 1991]. Die in der vorliegenden Arbeit verwendete, einheitliche Wahl der Ansatzfunktionen für das Verschiebungs- und Temperaturfeld trägt dieser Forderung Rechnung. Bezugnehmend auf gemischte Finite-Elemente-Formulierungen, siehe exemplarisch [Carstensen und Wriggers, 2009], ist dieser Sachverhalt eng mit der sogenannten inf-sup- oder auch Ladyženskaja-Babuška-Brezzi-Stabilitätsbedingung (LBB) verknüpft. Die Durchführung der Dekomposition in unbekannte und bekannte Größen liefert

$$\Theta_a(t) = \begin{Bmatrix} \Theta(t) \\ \bar{\Theta}(t) \end{Bmatrix} \quad \text{und} \quad \delta\Theta_a = \begin{Bmatrix} \delta\Theta \\ \delta\bar{\Theta} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \delta\Theta \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}, \quad (5.27)$$

wobei offensichtlich $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_u}}$, $\bar{\Theta}(t) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_p}}$, $\delta\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_u}}$ sowie $n_{\Theta_a} = n^n = n_{\Theta_u} + n_{\Theta_p}$ vorliegt. Die Definition der Zuordnungsoperationen

$$\Theta^e = \mathbf{Z}_{\Theta_a}^e \Theta_a = [\mathbf{Z}_{\Theta}^e \quad \bar{\mathbf{Z}}_{\Theta}^e] \begin{Bmatrix} \Theta \\ \bar{\Theta} \end{Bmatrix} = \mathbf{Z}_{\Theta}^e \Theta + \bar{\mathbf{Z}}_{\Theta}^e \bar{\Theta}, \quad \delta\Theta^e = \mathbf{Z}_{\Theta_a}^e \delta\Theta_a = \mathbf{Z}_{\Theta}^e \delta\Theta \quad (5.28)$$

für das Element e , $e = 1, \dots, n^e$, mit Hilfe der Koinzidenzmatrizen $\mathbf{Z}_{\Theta_a}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e \times n_{\Theta_a}}$, $\mathbf{Z}_{\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e \times n_{\Theta_u}}$ und $\bar{\mathbf{Z}}_{\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e \times n_{\Theta_p}}$ führt auf

$$\begin{aligned} \Theta^h(\mathbf{x}^h, t) &= \hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \Theta^e(t) = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\Theta_a}^e \Theta_a(t) \\ &= \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_{\Theta}^e \Theta(t) + \bar{\mathbf{Z}}_{\Theta}^e \bar{\Theta}(t) \}, \end{aligned} \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} \delta\Theta^h(\mathbf{x}^h) &= \delta\hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h) = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \delta\Theta^e = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\Theta_a}^e \delta\Theta_a \\ &= \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\Theta}^e \delta\Theta. \end{aligned} \quad (5.30)$$

In Bezug auf die Dimensionierung der elementbezogenen Größen gilt $\Theta^e = \{\Theta_1^e, \dots, \Theta_{n_{\text{en}}}^e\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e}$, $\delta\Theta^e = \{\delta\Theta_1^e, \dots, \delta\Theta_{n_{\text{en}}}^e\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e}$, $\mathbf{N}_{\Theta}^e = \{N_1, \dots, N_{n_{\text{en}}}\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e}$ sowie $n_{\Theta}^e = n_{\text{en}}$.

Zusätzlich zu den Approximationen der Primärvariablen werden Interpolationsansätze für die entsprechenden Zeitableitungen benötigt. Unter Verwendung identischer Ansatzfunktionen lauten diese

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t) &= \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \dot{\mathbf{u}}^e(t) = \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\mathbf{ua}}^e \dot{\mathbf{u}}_a(t) \\ &= \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^e \dot{\mathbf{u}}(t) + \bar{\mathbf{Z}}_{\mathbf{u}}^e \dot{\bar{\mathbf{u}}}(t) \}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t) &= \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \ddot{\mathbf{u}}^e(t) = \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\mathbf{ua}}^e \ddot{\mathbf{u}}_a(t) \\ &= \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^e \ddot{\mathbf{u}}(t) + \bar{\mathbf{Z}}_{\mathbf{u}}^e \ddot{\bar{\mathbf{u}}}(t) \}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} \dot{\Theta}^h(\mathbf{x}^h, t) &= \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \dot{\Theta}^e(t) = \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\Theta a}^e \dot{\Theta}_a(t) \\ &= \mathbf{N}_{\Theta}^{eT}(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_{\Theta}^e \dot{\Theta}(t) + \bar{\mathbf{Z}}_{\Theta}^e \dot{\bar{\Theta}}(t) \}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Mit Blick auf das Prinzip von D'Alembert (4.32) aus Abschnitt 4.2.1 ist es erforderlich, eine Näherung für den virtuellen Verzerrungstensor $\delta\mathbf{E}$ anzugeben, der durch Ausnutzung der Symmetrie, $\delta\mathbf{E} = \delta\mathbf{E}^T$, sowie der Äquivalenz des Skalarproduktes in Tensor- und Vektorschreibweise, $\tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta\mathbf{E} = \delta\mathbf{E}^T \tilde{\mathbf{T}}$, in einen Spaltenvektor der Gestalt

$$\delta\mathbf{E} = \{\delta E_{11}, \delta E_{22}, \delta E_{33}, 2\delta E_{12}, 2\delta E_{23}, 2\delta E_{31}\}^T \in \mathbb{R}^6 \quad (5.34)$$

überführt wird. Die zugehörige Komponentendarstellung des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors in Voigt Notation lautet:

$$\tilde{\mathbf{T}} = \{\tilde{T}_{11}, \tilde{T}_{22}, \tilde{T}_{33}, \tilde{T}_{12}, \tilde{T}_{23}, \tilde{T}_{31}\}^T \in \mathbb{R}^6 \quad (5.35)$$

Identisch hierzu besitzt der Cauchysche Spannungstensor als Spaltenvektor die Darstellung

$$\mathbf{T} = \{T_{11}, T_{22}, T_{33}, T_{12}, T_{23}, T_{31}\}^T \in \mathbb{R}^6. \quad (5.36)$$

Die räumliche Diskretisierung des virtuellen Verzerrungsvektors $\delta\mathbf{E}$ führt unter Berücksichtigung der Voigt Notation (5.34) sowie Definition (4.31) auf den Ausdruck

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{E}^h(\mathbf{X}^h, t) &= \delta\mathbf{E}^e(\phi_R^e(\mathbf{X}^h), \mathbf{u}^e(t), \delta\mathbf{u}^e) = \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}}^e(\phi_R^e(\mathbf{X}^h), \mathbf{u}^e(t)) \delta\mathbf{u}^e \\ &= \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}}^e(\phi_R^e(\mathbf{X}^h), \mathbf{u}^e(t)) \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^e \delta\mathbf{u}, \end{aligned} \quad (5.37)$$

mit der auf die Referenzkonfiguration bezogenen Verzerrungs-Verschiebungsmatrix

$$\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}}^e(\phi_R^e(\mathbf{X}^h), \mathbf{u}^e(t)) = [\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}1}^e \dots \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}n_{\text{en}}}^e] \in \mathbb{R}^{6 \times n_{\mathbf{u}}^e}. \quad (5.38)$$

Der detaillierte Aufbau der Untermatrizen $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{ua}}^e \in \mathbb{R}^{6 \times 3}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, ist im Anhang B.3 in Gl. (B.23) dargestellt. Neben den Ableitungen der Ansatzfunktionen in Bezug auf die materiellen Koordinaten,¹⁹

$$\text{Grad } N_a(\phi_R^e(\mathbf{X}^h)) = \begin{Bmatrix} N_{a,X} \\ N_{a,Y} \\ N_{a,Z} \end{Bmatrix} = \mathbf{J}^{e-T} \text{Grad}_{\xi} N_a(\xi) = \mathbf{J}^{e-T} \begin{Bmatrix} N_{a,\xi} \\ N_{a,\eta} \\ N_{a,\zeta} \end{Bmatrix}, \quad (5.39)$$

¹⁹Für weitere Details zu den inversen Koordinatentransformationen ϕ_R^e und ϕ_t^e , deren Funktionalmatrizen und die Bildung von Ableitungen sei auf die klassischen Textbücher von [Szabó und Babuška, 1991; Hughes, 2000; Bathe, 2002; Wriggers, 2008; Zienkiewicz et al., 2013; Zienkiewicz et al., 2014] verwiesen.

enthält die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix $\tilde{\mathbf{B}}_u^e$ die Komponenten des Deformationsgradienten, sodass gemäß den Gleichungen (2.26) und (2.27) eine lineare Abhängigkeit von den Knotenverschiebungen $\mathbf{u}^e(t)$ resultiert. Zur Vervollständigung der diskreten Kinematik ergeben sich die approximierten Versionen des Deformations- und Verschiebungsgradienten zu

$$\mathbf{F}^h(\mathbf{X}^h, t) = \mathbf{F}^e(\phi_R^e(\mathbf{X}^h), \mathbf{u}^e(t)) = \mathbf{H}^e(\phi_R^e(\mathbf{X}^h), \mathbf{u}^e(t)) + \mathbf{I} \quad \text{und} \quad (5.40)$$

$$\mathbf{H}^e(\phi_R^e(\mathbf{X}^h), \mathbf{u}^e(t)) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} \mathbf{u}_a^e \{ \text{Grad } N_a(\phi_R^e(\mathbf{X}^h)) \}^T = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} \mathbf{u}_a^e \begin{Bmatrix} N_{a,X} \\ N_{a,Y} \\ N_{a,Z} \end{Bmatrix}^T. \quad (5.41)$$

Auf dieser Basis wird die innere virtuelle Arbeit in der materiellen Darstellung, siehe Gl. (4.32), in den diskretisierten Ausdruck

$$\delta \pi_{\text{int}}^h(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}, t) = \delta \mathbf{u}^T \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t), \quad (5.42)$$

mit dem Spaltenvektor für die inneren Kräfte

$$\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) = \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_u^{eT} \underbrace{\left\{ \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}_u^{eT}(\mathbf{u}^e(t), \mathbf{x}^h) \tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{x}^h, t) d\Omega^e \right\}}_{\mathbf{f}_{\text{int}}^e(\mathbf{u}^e, \Theta^e, \mathbf{q}^e, t)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}, \quad (5.43)$$

überführt. Häufig werden die Gleichungen (5.42) und (5.43) auch als Total-Lagrange-Formulierung der inneren virtuellen Arbeit bezeichnet. Die Angabe der expliziten Zeitabhängigkeit in Gl. (5.43) entspringt aus den vorgegebenen Knotenverschiebungen $\bar{\mathbf{u}}(t)$ und den bekannten Knotentemperaturen $\bar{\Theta}(t)$. Der lokale Spaltenvektor der Spannungen

$$\tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{x}^h, t) = \tilde{\Phi}^e \left(\mathbf{E}^e(\mathbf{x}^h, t), \hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t), \hat{\mathbf{q}}^e(\mathbf{x}^h, t) \right) \in \mathbb{R}^6 \quad (5.44)$$

folgt aus einer vektorwertig formulierten Spannungsbeziehung, vgl. mit Gl. (2.177), des entsprechenden Materialmodells. An die Stelle des symmetrischen Verzerrungstensors tritt der Verzerrungsvektor (Spaltenvektor)

$$\mathbf{E}^e = \tilde{\mathbf{B}}_u^e \mathbf{u}^e = \tilde{\mathbf{B}}_u^e \{ \mathbf{z}_u^e \mathbf{u} + \bar{\mathbf{z}}_u^e \bar{\mathbf{u}} \}, \quad (5.45)$$

mit der Komponentendarstellung

$$\mathbf{E} = \{ E_{11}, E_{22}, E_{33}, 2E_{12}, 2E_{23}, 2E_{31} \}^T \in \mathbb{R}^6. \quad (5.46)$$

Nach Hartmann [2003] und Wriggers [2008] gelingt es, durch Formulierung von $\delta \pi_{\text{int}}^h$ mit Größen in der Momentankonfiguration eine effizientere Elementformulierung zu konstruieren. Hierzu ist es zunächst erforderlich, die Variation des symmetrischen Anteils des räumlichen Verschiebungsgradienten $\text{sym} \delta \mathbf{h}$, vgl. Gl. (4.34), durch die eingeführten Ansatzfunktionen zu approximieren. Unter Einbeziehung der Symmetrieeigenschaft kann die tensorielle Größe $\text{sym} \delta \mathbf{h}$ als Spaltenvektor

$$\text{sym} \delta \mathbf{h} = \{ \delta h_{11}, \delta h_{22}, \delta h_{33}, (\delta h_{12} + \delta h_{21}), (\delta h_{23} + \delta h_{32}), (\delta h_{31} + \delta h_{13}) \}^T \quad (5.47)$$

geschrieben werden. Durch Deklaration der Verzerrungs-Verschiebungsmatrix

$$\mathbf{B}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) = [\mathbf{B}_{u1}^e \quad \dots \quad \mathbf{B}_{u n_{en}}^e] \in \mathbb{R}^{6 \times n_u^e}, \quad (5.48)$$

mit

$$\mathbf{B}_{ua}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) = \begin{bmatrix} N_{a,x} & 0 & 0 \\ 0 & N_{a,y} & 0 \\ 0 & 0 & N_{a,z} \\ N_{a,y} & N_{a,x} & 0 \\ 0 & N_{a,z} & N_{a,y} \\ N_{a,z} & 0 & N_{a,x} \end{bmatrix}, \quad a = 1, \dots, n_{en}, \quad (5.49)$$

gelingt es den Spaltenvektor als

$$\text{sym} \delta \mathbf{h}^h(\mathbf{x}^h, t) = \text{sym} \delta \mathbf{h}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h), \delta \mathbf{u}^e) = \mathbf{B}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \delta \mathbf{u}^e = \mathbf{B}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_u^e \delta \mathbf{u} \quad (5.50)$$

auszudrücken.²⁰ Im Gegensatz zu $\tilde{\mathbf{B}}_u^e$ weist jedoch die Matrix \mathbf{B}_u^e eine schwachbesetzte Struktur (Sparse-Struktur) auf. Infolgedessen lassen sich Nulloperationen bei Produkten zwischen \mathbf{B}_u^e und anderen Matrizen vermeiden. Die Ableitungen der Ansatzfunktionen nach den räumlichen Koordinaten in Gl. (5.49) können nach der Vorschrift

$$\text{grad } N_a(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) = \begin{Bmatrix} N_{a,x} \\ N_{a,y} \\ N_{a,z} \end{Bmatrix} = \mathbf{j}^{e-T} \text{Grad}_{\xi} N_a(\xi) = \mathbf{j}^{e-T} \begin{Bmatrix} N_{a,\xi} \\ N_{a,\eta} \\ N_{a,\zeta} \end{Bmatrix} \quad (5.51)$$

berechnet werden. Unter Berücksichtigung des räumlichen virtuellen Verzerrungsvektors und der Vektorform für die Cauchy Spannungen wird die FE-Formulierung von Gl. (4.33), als

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_u^{eT} \overbrace{\left\{ \int_{\omega^e} \mathbf{B}_u^{eT}(\mathbf{x}^h) \mathbf{T}^e(\mathbf{x}^h, t) d\omega^e \right\}}^{\mathbf{f}_{\text{int}}^e(\mathbf{u}^e, \Theta^e, \mathbf{q}^e, t)} \\ &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_u^{eT} \left\{ \int_{\omega^e} \mathbf{B}_u^{eT}(\mathbf{x}^h) \overbrace{\left(\frac{1}{J^e} \mathbf{F}_{23}^e(\chi_R^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)), t) \tilde{\mathbf{T}}^e(\chi_R^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)), t) \right)}^{\mathbf{T}^e(\mathbf{x}^h, t)} d\omega^e \right\} \end{aligned} \quad (5.52)$$

wiedergegeben. Die Äquivalenz von Gl. (5.52) zur Total-Lagrange-Formulierung (5.43) zeigt sich unter Verwendung von $J^e := \det \mathbf{F}^e$ und den Transformationsbeziehungen

$$d\omega^e = J^e d\Omega^e, \quad \mathbf{T}^e = 1/J^e \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{T}}^e, \quad \text{sym} \delta \mathbf{h}^e = \mathbf{F}_{23}^{e-T} \delta \mathbf{E}^e, \quad (5.53)$$

²⁰Die Darstellung der Matrix $\mathbf{B}_u^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h))$ als Funktion der inversen Koordinatentransformation $\phi_t^e(\mathbf{x}^h)$ offenbart, dass die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix ebenfalls von der Deformation abhängt.

wobei Letztere ebenfalls $\tilde{\mathbf{B}}_u^{eT} = \mathbf{B}_u^{eT} \mathbf{F}_{23}^e$ impliziert.²¹ Der komponentenweise Aufbau des Push-Forward-Operators in Matrixnotation \mathbf{F}_{23}^e wird in Gl. (B.24) im Anhang B.3 vorgestellt. Die Anwendung eines numerischen Quadratschemas mit n_{GP}^e Integrationspunkten, siehe Abschnitt B.2, liefert formal

$$\mathbf{f}_{int}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) \approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_u^{eT} \left\{ \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \mathbf{B}_u^{eT}(\xi_k) \mathbf{T}^e(\xi_k, t) \det \mathbf{j}^e(\xi_k) \right\}, \quad (5.54)$$

mit den Koordinaten der Integrationspunkte ξ_k , den Wichtungsfaktoren w_k sowie der am Integrationspunkt ausgewerteten Determinante der Jacobi-Matrix $\det \mathbf{j}^e(\xi_k)$.

Infolge der Raumdiskretisierung und der angewendeten numerischen Integration müssen zur Bestimmung des Spannungszustands im Element e , $e = 1, \dots, n^e$, die inneren Variablen $\mathbf{q}^e(\mathbf{X}_k, t) \in \mathbb{R}^{n_q}$ an den Integrationspunkten $\mathbf{X}_k = \chi_R^e(\xi_k)$ ausgewertet werden. Dies führt für die Evolutionsgleichungen (2.178) auf die Darstellung

$$\dot{\mathbf{q}}^e(\xi_k, t) = \tilde{\mathbf{r}}^e \left(\mathbf{E}^e(\xi_k, t), \hat{\Theta}^e(\xi_k, t), \mathbf{q}^e(\xi_k, t) \right), \quad \mathbf{q}^e(\xi_k, t_0) = \mathbf{q}_0. \quad (5.55)$$

Formal lassen sich alle inneren Variablen in einen globalen Spaltenvektor $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_Q}$, mit der Länge n_Q , zusammenfassen. Die Dimension n_Q ist durch das Produkt aus der Anzahl aller Quadraturpunkte der Vernetzung $n_i = n^e \times n_{GP}^e$ zur Integration von $\delta \pi_{int}^h$ und der Anzahl der inneren Variablen pro Gauß-Punkt n_q gegeben, d. h. $n_Q = n_i \times n_q$. Abb. 5.3 zeigt die geschilderte Assemblierungsprozedur. In identischer Weise zu den

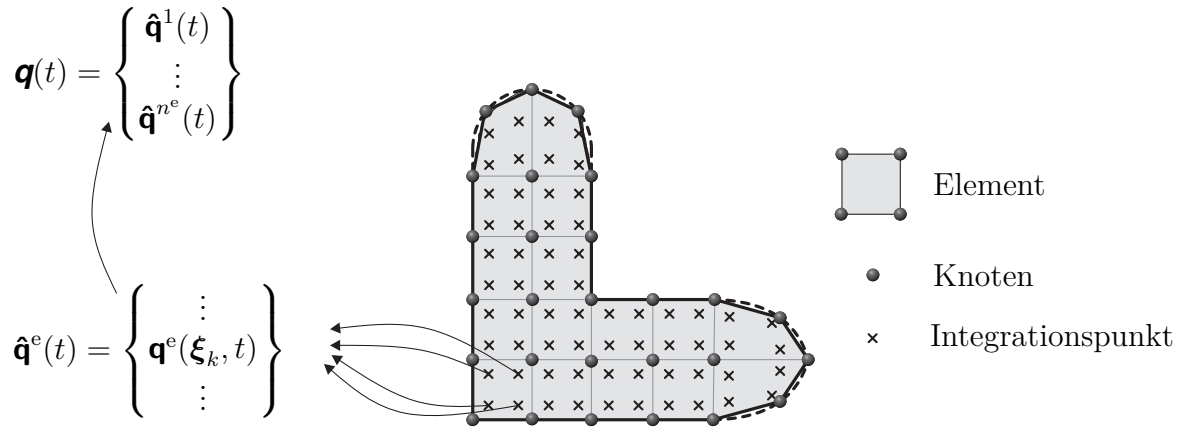


Abbildung 5.3: Veranschaulichung der Assemblierungsprozedur für die inneren Variablenvektoren am Gauß-Punkt ξ_k , $k = 1, \dots, n_{GP}^e$ des Elements e in den globalen Vektor $\mathbf{q}(t)$.

Koinzidenzmatrizen für die Elementknotenverschiebungen kann eine Zuordnungsoperation

$$\mathbf{q}^e(\xi_k, t) = \mathbf{Z}_q^{e(k)} \mathbf{q}(t), \quad (5.56)$$

²¹Gl. (5.53)₃ folgt aus der tensoriellen Push-Forward-Operation

$$\text{sym} \delta \mathbf{h} = \mathbf{F}^{-T} \delta \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1} = \left[\mathbf{F}^{-T} \otimes \mathbf{F}^{-T} \right]^{T_{23}} \delta \mathbf{E}.$$

mit der Koinzidenzmatrix $\mathbf{Z}_q^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q \times n_Q}$, eingeführt werden, welche aus $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ den lokalen Vektor $\mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t) \in \mathbb{R}^{n_q}$ am Gauß-Punkt $\boldsymbol{\xi}_k$ im Element e , $e = 1, \dots, n^e$, herausfiltert. Umgekehrt gilt

$$\mathbf{q}(t) = \sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} \mathbf{Z}_q^{e(k)T} \mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t), \quad (5.57)$$

da im Gegensatz zu den Elementfreiheitsgraden die inneren Variablen punktweise entkoppelt sind und die lokalen, gewöhnlichen Differentialgleichungen (5.55) nur von direkten Größen im jeweiligen Gauß-Punkt abhängen, siehe [Ellsiepen und Hartmann, 2001; Hartmann, 2003; Hartmann, 2005]. Letzteres impliziert auch

$$\mathbf{r}_Q = \sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} \mathbf{Z}_q^{e(k)T} \tilde{\mathbf{r}}^e \left(\mathbf{E}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t), \hat{\Theta}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t), \mathbf{q}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t) \right). \quad (5.58)$$

Das formale Assemblieren aller lokalen Evolutionsgleichungen zu einem globalen System von gewöhnlichen Differentialgleichungen resultiert in

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t), \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0. \quad (5.59)$$

Die Trennung von Raum- und Zeitdiskretisierung in den Interpolationsansätzen für die Feldvariablen ermöglicht es, den virtuellen Trägheitsterm $\delta\pi_{\text{kin}}$ in Gl. (4.32) durch den Ausdruck

$$\delta\pi_{\text{kin}}^h(\ddot{\mathbf{u}}, \delta\mathbf{u}, t) = \delta\mathbf{u}^T \left\{ \mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \overline{\mathbf{M}}\ddot{\overline{\mathbf{u}}}(t) \right\} = \delta\mathbf{u}^T \mathbf{f}_{\text{kin}}(\ddot{\mathbf{u}}, t), \quad (5.60)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_u^{eT} \left[\int_{\Omega^e} \mathbf{N}_u^{eT}(\mathbf{X}^h) \mathbf{N}_u^e(\mathbf{X}^h) \varrho_R^e(\mathbf{X}^h) d\Omega^e \right] \mathbf{Z}_u^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_u^{eT} \left[\sum_{k=1}^{\tilde{n}_{GP}^e} w_k \mathbf{N}_u^{eT}(\boldsymbol{\xi}_k) \mathbf{N}_u^e(\boldsymbol{\xi}_k) \varrho_R^e(\boldsymbol{\xi}_k) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}_k) \right] \mathbf{Z}_u^e, \end{aligned} \quad (5.61)$$

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{M}} &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_u^{eT} \left[\int_{\Omega^e} \mathbf{N}_u^{eT}(\mathbf{X}^h) \mathbf{N}_u^e(\mathbf{X}^h) \varrho_R^e(\mathbf{X}^h) d\Omega^e \right] \overline{\mathbf{Z}}_u^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_u^{eT} \left[\sum_{k=1}^{\tilde{n}_{GP}^e} w_k \mathbf{N}_u^{eT}(\boldsymbol{\xi}_k) \mathbf{N}_u^e(\boldsymbol{\xi}_k) \varrho_R^e(\boldsymbol{\xi}_k) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}_k) \right] \overline{\mathbf{Z}}_u^e, \end{aligned} \quad (5.62)$$

und

$$\mathbf{f}_{\text{kin}}(\ddot{\mathbf{u}}, t) = \mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \overline{\mathbf{M}}\ddot{\overline{\mathbf{u}}}(t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}, \quad (5.63)$$

zu ersetzen. Aufgrund der Massenerhaltung kennzeichnen die Größen $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}$ und $\bar{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{up}}$ in Gl. (5.60) konstante, deformationsunabhängige Massenmatrizen. Abweichend von der benötigten Genauigkeit für die numerische Integration der inneren virtuellen Kräfte sollte zur Berechnung der sogenannten konsistenten Massenmatrizen, siehe [Archer, 1963], eine Quadratur höherer Ordnung Anwendung finden, damit die Produkte der in \mathbf{M} und $\bar{\mathbf{M}}$ enthaltenen Monome²² der Ansatzfunktionen ausreichend exakt integriert werden, siehe hierzu auch [Hughes, 2000, S. 423–458]. Aus diesem Grund symbolisiert \tilde{n}_{GP}^e eine differierende Anzahl von Integrationspunkten im Vergleich zu Gl. (5.54), wodurch in Abhängigkeit der eingesetzten Integrationsregel gleichzeitig auch eine Anpassung der Koordinaten $\boldsymbol{\xi}_k$ und Wichtungsfaktoren w_k impliziert wird. Eine sogenannte konzentrierte Massenmatrix geht aus der Diagonalisierung der Matrix \mathbf{M} beispielsweise durch die Anwendung spezieller Quadraturformeln, wie die Trapez- oder Simpsonregel, hervor.²³ Für weitere Details zu Diagonalisierungstechniken von Massenmatrizen sei auf die Arbeiten von Fried und Malkus [1975] und Hinton et al. [1976] verwiesen.

Die räumliche Diskretisierung der externen virtuellen Energie liefert unter Beachtung der eingeführten Dekomposition

$$\delta\pi_{\text{ext}}^h(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}, t) = \delta\pi_{\text{ext}\mathcal{B}}^h(\delta\mathbf{u}) + \delta\pi_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}^h(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}, t) = \delta\mathbf{u}^T \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t), \quad (5.64)$$

mit

$$\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) = \mathbf{f}_{\text{ext}\mathcal{B}}(t) + \mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}(\mathbf{u}, t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}. \quad (5.65)$$

Die in dem externen Lastvektor $\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ integrierten Volumenkräfte $\mathbf{f}_{\text{ext}\mathcal{B}}(t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ besitzen die explizite Gestalt

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{\text{ext}\mathcal{B}}(t) &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_u^{eT} \int_{\Omega^e} \varrho_R^e(\mathbf{x}^h) \mathbf{N}_u^{eT}(\mathbf{x}^h) \mathbf{k}^e(\mathbf{x}^h, t) d\Omega^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_u^{eT} \sum_{k=1}^{\tilde{n}_{GP}^e} w_k \varrho_R^e(\boldsymbol{\xi}_k) \mathbf{N}_u^{eT}(\boldsymbol{\xi}_k) \mathbf{k}^e(\boldsymbol{\xi}_k, t) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}_k), \end{aligned} \quad (5.66)$$

wobei das Matrix-Vektorprodukt aus der transponierten Formfunktionsmatrix \mathbf{N}_u^{eT} und der bekannten volumenverteilten Kraftdichtefunktion $\mathbf{k}^e \in \mathbb{R}^3$ eine ähnliche Genauigkeit in der numerischen Integration wie die konsistente Massenmatrix erfordert.²⁴

Zur Berücksichtigung der allgemeinen zeit- und deformationsabhängigen Spannungsrandbedingungen $\mathbf{t} = \mathbf{f}_s(\mathbf{x}^h, t) \in \mathbb{R}^3$ in der Momentankonfiguration, siehe Abschnitt 4.1, wird eine Oberflächendiskretisierung des Neumann-Randes

$$\partial_s \chi_t[\mathcal{B}] \approx \gamma_s^h = \bigcup_{e=1}^{\hat{n}_s^e} \gamma^e \quad (5.67)$$

²²In der Algebra wird ein Polynom, welches nur aus einem Glied, d. h. dem Produkt aus einem Koeffizienten a und der Potenz einer Variablen ξ , z. B. $a\xi^3$, besteht als Monom bezeichnet.

²³Im Fall einer konzentrierten Massenmatrix verschwindet der Anteil $\bar{\mathbf{M}}$, d. h. $\bar{\mathbf{M}} = \mathbf{0}$.

²⁴Fällt die Wahl für die vorgegebene volumenverteilte Kraftdichtefunktion \mathbf{k}^e auf einen analogen knotenweise definierten Interpolationsansatz (5.15), resultieren elementbezogene Massenmatrizen.

in \hat{n}_s^e Oberflächenelemente durchgeführt. Wie Abb. 5.1 beispielsweise zeigt, bedingt eine konforme dreidimensionale FE-Vernetzung der Struktur mit 4-knotigen Tetraeder-Elementen (Tet4) 3-knotige Dreieck-Facetten (Tri3) an der Oberfläche. Die Projektion der FE-Ansätze der Volumendiskretisierung auf den facettierten Neumann-Rand führen auf Interface-Elemente, die sich gemeinsam mit den konformen Strukturelementen \tilde{n}_{en} Knoten auf der entsprechenden überlappenden Flächenregion teilen. Der Anteil $\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}(\mathbf{u}, t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ des externen Lastvektors $\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t)$ lautet dann:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}(\mathbf{u}, t) &= \sum_{e=1}^{\hat{n}_s^e} \mathbf{Z}_{\text{us}}^{\text{eT}} \int_{\gamma^e} \mathbf{N}_{\text{us}}^{\text{eT}}(\mathbf{x}^h) \mathbf{t}^e(\mathbf{x}^h, t) d\gamma^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{\hat{n}_s^e} \mathbf{Z}_{\text{us}}^{\text{eT}} \sum_{k=1}^{n_{\text{GPs}}^e} w_k \mathbf{N}_{\text{us}}^{\text{eT}}(\boldsymbol{\xi}_k) \tilde{\mathbf{f}}_s^e(\boldsymbol{\xi}_k, \mathbf{u}^e, t) \det \mathbf{j}_s^e(\boldsymbol{\xi}_k) \end{aligned} \quad (5.68)$$

Die Deformationsabhängigkeit in $\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}(\mathbf{u}, t)$ entspringt der Modellierung der Amplituden- und Richtungsabhängigkeit für die Spannungsrandbedingungen $\mathbf{t}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{f}_s^e(\mathbf{x}^h, t) = \tilde{\mathbf{f}}_s^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h), \mathbf{u}^e(t), t) \in \mathbb{R}^3$. Im Zusammenhang mit der eingeführten Oberflächenvernetzung kennzeichnet $\mathbf{N}_{\text{us}}^e \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{us}}^e}$ die Matrix der Ansatzfunktionen zur Interpolation des primären und virtuellen Verschiebungsfeldes im flächenförmigen Gebiet γ^e , d. h.

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t) \big|_{\gamma_s^h} &= \hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{u}^e(t) \\ &= \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_{\text{us}}^e \mathbf{u}(t) + \bar{\mathbf{Z}}_{\text{us}}^e \bar{\mathbf{u}}(t) \}, \end{aligned} \quad (5.69)$$

$$\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h) \big|_{\gamma_s^h} = \delta \hat{\mathbf{u}}^e(\mathbf{x}^h) = \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \delta \mathbf{u}^e = \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\text{us}}^e \delta \mathbf{u}, \quad (5.70)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{\text{eT}} &= \{\mathbf{u}_1^{\text{eT}}, \dots, \mathbf{u}_{\tilde{n}_{en}}^{\text{eT}}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{us}}^e}, \quad \delta \mathbf{u}^{\text{eT}} = \{\delta \mathbf{u}_1^{\text{eT}}, \dots, \delta \mathbf{u}_{\tilde{n}_{en}}^{\text{eT}}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{us}}^e}, \\ \mathbf{u}_a^e &= \{u_a^e, v_a^e, w_a^e\}^T \in \mathbb{R}^3, \quad \delta \mathbf{u}_a^e = \{\delta u_a^e, \delta v_a^e, \delta w_a^e\}^T \in \mathbb{R}^3, \quad a = 1, \dots, \tilde{n}_{en}. \end{aligned}$$

Die Zuordnung der $n_{\text{us}}^e = 3 \times \tilde{n}_{en}$ lokalen Verschiebungsfreiheitsgrade in $\mathbf{u}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{us}}^e}$ bzw. der virtuellen Verschiebungsfreiheitsgrade in $\delta \mathbf{u}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{us}}^e}$ zu den globalen Vektoren $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, $\bar{\mathbf{u}}(t) \in \mathbb{R}^{n_{up}}$, $\delta \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ übernehmen die Koinzidenzmatrizen $\mathbf{Z}_{\text{us}}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{us}}^e \times n_{uu}}$ und $\bar{\mathbf{Z}}_{\text{us}}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{us}}^e \times n_{up}}$. Die Bestimmung der Positionen in der Referenz- und Momentankonfiguration innerhalb eines Oberflächenelements e , $e = 1, \dots, \hat{n}_s^e$, drücken die isoparametrischen Transformationsbeziehungen

$$\mathbf{X}^h = \boldsymbol{\chi}_{\text{Rs}}^e(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X}^e \quad \text{und} \quad \mathbf{x}^h = \boldsymbol{\chi}_{ts}^e(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{x}^e \quad (5.71)$$

aus. Die Reduktion des Parameterraums einer Elementfacette auf eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit, d. h. $\Omega_{\square} \subset \mathbb{R}^2$, hat neben der Anpassung der Quadratur, ausgedrückt durch die Anzahl von Integrationspunkten n_{GPs}^e , die Aussagen

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi} &= \{\xi, \eta\}^T \in \mathbb{R}^2, \quad \boldsymbol{\xi}_k = \{\xi_k, \eta_k\}^T \in \mathbb{R}^2, \\ \mathbf{j}_s^e(\boldsymbol{\xi}) &= \text{Grad}_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}_{ts}^e(\boldsymbol{\xi}) = [\boldsymbol{\chi}_{ts, \xi}^e(\boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\chi}_{ts, \eta}^e(\boldsymbol{\xi})] \in \mathbb{R}^{3 \times 2}, \quad \det \mathbf{j}_s^e(\boldsymbol{\xi}) = \|\boldsymbol{\chi}_{ts, \xi}^e(\boldsymbol{\xi}) \times \boldsymbol{\chi}_{ts, \eta}^e(\boldsymbol{\xi})\|, \end{aligned} \quad (5.72)$$

mit der Koordinatentransformation $\chi_{ts}^e : \Omega_\square \rightarrow \gamma^e$, $\xi \mapsto \mathbf{x}^h = \chi_{ts}^e(\xi)$, und

$$\mathbf{J}_s^e(\xi) = \text{Grad}_\xi \chi_{Rs}^e(\xi) \in \mathbb{R}^{3 \times 2}, \quad \det \mathbf{J}_s^e(\xi) = \|\chi_{Rs, \xi}^e(\xi) \times \chi_{Rs, \eta}^e(\xi)\|, \quad (5.73)$$

mit der Koordinatentransformation $\chi_{Rs}^e : \Omega_\square \rightarrow \Gamma^e$, $\xi \mapsto \mathbf{X}^h = \chi_{Rs}^e(\xi)$, zur Folge.

Die Kombination der Anteile (5.52), (5.60), (5.66) und (5.68) liefert die diskretisierte schwache Form der Impulsbilanz

$$\begin{aligned} \delta \pi_u^h(\mathbf{u}, \ddot{\mathbf{u}}, \Theta, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}, t) &= \delta \pi_{\text{kin}}^h(\ddot{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}, t) + \delta \pi_{\text{int}}^h(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}, t) - \delta \pi_{\text{ext}}^h(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}, t) \\ &= \delta \mathbf{u}^T \left\{ \mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}}(t) + \overline{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) \right\} = 0. \end{aligned} \quad (5.74)$$

Aufgrund der Beliebigkeit der Variation $\delta \mathbf{u}$ verschwindet der Klammerausdruck in Gl. (5.74) und es resultiert ein System von gewöhnlichen nichtlinearen Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}}(t) = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) - \overline{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(t), \quad (5.75)$$

mit

$$\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}, \quad (5.76)$$

das die semidiskreten Bewegungsgleichungen repräsentiert.

Im Folgenden soll die diskretisierte schwache Form der Wärmeleitungsgleichung

$$\delta \pi_\Theta^h(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}, t) = \delta \pi_{c_p}^h + \delta \pi_\kappa^h - \delta \pi_{r_\Theta}^h - \delta \pi_q^h \quad (5.77)$$

angeben werden. Der erste Summand in der diskretisierten Variationsgleichung (5.77) wird wie folgt gebildet:

$$\delta \pi_{c_p}^h(\mathbf{u}, \Theta, \dot{\Theta}, \delta \Theta, t) = \delta \Theta^T \mathbf{p}_{c_p}(\mathbf{u}, \Theta, \dot{\Theta}, t), \quad (5.78)$$

mit

$$\mathbf{p}_{c_p}(\mathbf{u}, \Theta, \dot{\Theta}, t) = \mathbf{c}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\Theta}(t) + \overline{\mathbf{c}}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\Theta}(t) \quad (5.79)$$

Die hierin enthaltenen Kapazitätsmatrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \left[\int_{\Omega^e} \varrho_R^e(\mathbf{X}^h) c_p^e(\mathbf{X}^h, t) \mathbf{N}_\Theta^e(\mathbf{X}^h) \mathbf{N}_\Theta^{eT}(\mathbf{X}^h) d\Omega^e \right] \mathbf{z}_\Theta^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \left[\sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \varrho_R^e(\xi_k) c_p^e(\xi_k, t) \mathbf{N}_\Theta^e(\xi_k) \mathbf{N}_\Theta^{eT}(\xi_k) \det \mathbf{J}^e(\xi_k) \right] \mathbf{z}_\Theta^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}} \end{aligned} \quad (5.80)$$

und

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{c}}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \left[\int_{\Omega^e} \varrho_R^e(\mathbf{X}^h) c_p^e(\mathbf{X}^h, t) \mathbf{N}_\Theta^e(\mathbf{X}^h) \mathbf{N}_\Theta^{eT}(\mathbf{X}^h) d\Omega^e \right] \overline{\mathbf{z}}_\Theta^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \left[\sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \varrho_R^e(\xi_k) c_p^e(\xi_k, t) \mathbf{N}_\Theta^e(\xi_k) \mathbf{N}_\Theta^{eT}(\xi_k) \det \mathbf{J}^e(\xi_k) \right] \overline{\mathbf{z}}_\Theta^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta p}} \end{aligned} \quad (5.81)$$

besitzen eine vergleichbare Struktur zu den Massenmatrizen, sind jedoch aufgrund der skalaren Wärmekapazitätsfunktion $c_p^e(\mathbf{X}^h, t) = \hat{c}_p^e(J^e, \hat{\Theta}^e)$ von den Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_a(t)$ und den Knotentemperaturen $\Theta_a(t)$ abhängig.²⁵

Zur Darstellung des darauf folgenden Summanden

$$\delta\pi_\kappa^h(\mathbf{u}, \Theta, \delta\Theta, t) = \delta\Theta^T \mathbf{p}_\kappa(\mathbf{u}, \Theta, t) \quad (5.82)$$

in Bezug auf die Momentankonfiguration erfolgt zunächst eine Approximation der räumlichen Gradienten

$$\begin{aligned} \text{grad } \Theta^h(\mathbf{x}^h, t) &= \text{grad } \hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t) = \mathbf{B}_\Theta^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \Theta^e(t) \\ &= \mathbf{B}_\Theta^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_\Theta^e \Theta(t) + \bar{\mathbf{Z}}_\Theta^e \bar{\Theta}(t) \}, \end{aligned} \quad (5.83)$$

$$\text{grad } \delta\Theta^h(\mathbf{x}^h) = \text{grad } \delta\hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h) = \mathbf{B}_\Theta^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \delta\Theta^e = \mathbf{B}_\Theta^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_\Theta^e \delta\Theta \quad (5.84)$$

durch die Matrix

$$\mathbf{B}_\Theta^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h)) = [\mathbf{B}_{\Theta 1}^e \dots \mathbf{B}_{\Theta n_{\text{en}}}^e] \in \mathbb{R}^{3 \times n_\Theta^e}, \quad (5.85)$$

mit den spaltenweise angeordneten Vektoren

$$\mathbf{B}_{\Theta a}^e = \begin{bmatrix} N_{a,x} \\ N_{a,y} \\ N_{a,z} \end{bmatrix}, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}. \quad (5.86)$$

Die Substitution der Ansätze (5.83) und (5.84) in Gl. (4.40) liefert den globalen Spaltenvektor

$$\mathbf{p}_\kappa(\mathbf{u}, \Theta, t) = \mathbf{C}_\kappa(\mathbf{u}, \Theta, t) \Theta(t) + \bar{\mathbf{C}}_\kappa(\mathbf{u}, \Theta, t) \bar{\Theta}(t) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}. \quad (5.87)$$

Die mit der thermischen Konduktivität $\kappa^e(\mathbf{x}^h, t) = \hat{\kappa}^e(\hat{\Theta}^e)$ assoziierten Matrizen lauten

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_\kappa(\mathbf{u}, \Theta, t) &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_\Theta^{eT} \left[\int_{\omega^e} \kappa^e(\mathbf{x}^h, t) \mathbf{B}_\Theta^{eT}(\mathbf{x}^h) \mathbf{B}_\Theta^e(\mathbf{x}^h) d\omega^e \right] \mathbf{Z}_\Theta^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_\Theta^{eT} \left[\sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \kappa^e(\xi_k, t) \mathbf{B}_\Theta^{eT}(\xi_k) \mathbf{B}_\Theta^e(\xi_k) \det \mathbf{j}^e(\xi_k) \right] \mathbf{Z}_\Theta^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}} \end{aligned} \quad (5.88)$$

und

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{C}}_\kappa(\mathbf{u}, \Theta, t) &= \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_\Theta^{eT} \left[\int_{\omega^e} \kappa^e(\mathbf{x}^h, t) \mathbf{B}_\Theta^{eT}(\mathbf{x}^h) \mathbf{B}_\Theta^e(\mathbf{x}^h) d\omega^e \right] \bar{\mathbf{Z}}_\Theta^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_\Theta^{eT} \left[\sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \kappa^e(\xi_k, t) \mathbf{B}_\Theta^{eT}(\xi_k) \mathbf{B}_\Theta^e(\xi_k) \det \mathbf{j}^e(\xi_k) \right] \bar{\mathbf{Z}}_\Theta^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta p}}, \end{aligned} \quad (5.89)$$

²⁵Zur Reduktion des numerischen Aufwands auf Elementebene werden die Volumenintegrale für alle folgenden globalen deformations- und temperaturabhängigen Vektoren \mathbf{p}_κ , \mathbf{p}_{r_Θ} bzw. Matrizen \mathbf{C}_p , $\bar{\mathbf{C}}_p$ durch dieselbe Quadraturformel wie in Gl. (5.54) ausgewertet. Hierbei ist darauf zu achten, dass eine ausreichende Quadraturordnung durch die Festlegung von n_{GP}^e zur numerischen Integration der genannten Größen und deren Linearisierungen gewählt wird.

wobei die explizite Verschiebungsabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeitsmatrizen aus den räumlichen Gradientenoperatoren $\mathbf{B}_\Theta^e \in \mathbb{R}^{3 \times n_\Theta^e}$ herrührt.

Infolge des volumetrischen Produktionsterms $p_\Theta^e(\mathbf{X}^h, t) = \hat{p}_\Theta^e(\mathbf{E}^e, \dot{\mathbf{E}}^e, \hat{\Theta}^e, \dot{\hat{\Theta}}^e, \mathbf{q}^e, \dot{\mathbf{q}}^e)$ resultiert

$$\delta \pi_{r_\Theta}^h(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \delta \Theta, t) = \delta \Theta^T \mathbf{p}_{r_\Theta}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t), \quad (5.90)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{r_\Theta}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) &= \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \int_{\Omega^e} \varrho_R^e(\mathbf{x}^h) p_\Theta^e(\mathbf{x}^h, t) \mathbf{N}_\Theta^e(\mathbf{x}^h) d\Omega^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \varrho_R^e(\xi_k) p_\Theta^e(\xi_k, t) \mathbf{N}_\Theta^e(\xi_k) \det \mathbf{J}^e(\xi_k) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}. \end{aligned} \quad (5.91)$$

Es sei angemerkt, dass die Abhängigkeit von den diskreten inneren Variablen für p_Θ^e und der Einsatz derselben in Abb. 5.3 illustrierten Assemblierungsprozedur eine identische Quadraturformel im Vergleich zu Gl. (5.54) induzieren.²⁶

In vollständiger Analogie zu den oberflächenverteilten mechanischen Lasten resultieren für die Diskretisierung des letzten Summanden $\delta \pi_q^h$ die Ausdrücke

$$\delta \pi_q^h(\mathbf{u}, \Theta, \delta \Theta, t) = \delta \Theta^T \mathbf{p}_{\Theta q}(\mathbf{u}, \Theta, t) \quad (5.92)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{\Theta q}(\mathbf{u}, \Theta, t) &= \sum_{e=1}^{\hat{n}_\Theta^e} \mathbf{z}_{\Theta q}^{eT} \int_{\omega^e} (f_q^e(\mathbf{x}^h, t) + \bar{f}_{\Theta q}^e(\mathbf{x}^h, t)) \mathbf{N}_{\Theta q}^e(\mathbf{x}^h) d\gamma^e \\ &\approx \sum_{e=1}^{\hat{n}_\Theta^e} \mathbf{z}_{\Theta q}^{eT} \sum_{k=1}^{n_{GPq}^e} w_k (f_q^e(\xi_k, t) + \bar{f}_{\Theta q}^e(\xi_k, t)) \mathbf{N}_{\Theta q}^e(\xi_k) \det \mathbf{J}_s^e(\xi_k) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}, \end{aligned} \quad (5.93)$$

mit $\bar{f}_{\Theta q}^e(\mathbf{x}^h, t) = f_{\Theta q}^e(\mathbf{x}^h, \hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t), t)$. Die geometrisch nichtlinearen Neumann-Randbedingungen und gemischten Randbedingungen für den Cauchyschen Wärmefluss, siehe Abschnitt 4.1, werden durch die skalaren Funktionen $f_q^e(\mathbf{x}^h, t)$ und $f_{\Theta q}^e(\mathbf{x}^h, \hat{\Theta}^e, t)$ widergespiegelt. Eine hinreichend genaue räumliche Quadraturordnung zur numerischen Integration von Gl. (5.93) findet durch n_{GPq}^e Berücksichtigung. Im Zuge der zusätzlichen Oberflächendiskretisierung des kombinierten Randes

$$\partial_q \chi_t[\mathcal{B}] \cup \partial_{\Theta q} \chi_t[\mathcal{B}] \approx \gamma_q^h \cup \gamma_{\Theta q}^h = \bigcup_{e=1}^{\hat{n}_\Theta^e} \gamma^e \quad (5.94)$$

in \hat{n}_Θ^e Oberflächenelemente, mit \tilde{n}_{en} Knoten und $n_{\Theta q}^e = \tilde{n}_{en}$ Temperaturfreiheitsgraden pro Element, sind außerdem die Zuordnungsmatrizen $\mathbf{z}_{\Theta q}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta q}^e \times n_{\Theta u}}$, $\mathbf{z}_{\Theta p}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta p}^e \times n_{\Theta p}}$

²⁶Die im Zuge der konsistenten Linearisierung, siehe Abschnitt 5.4, generierten Monome der Ansatzfunktionen in den Funktionalmatrizen werden daher für ein thermomechanisch gekoppeltes Problem die benötigte Quadraturordnung, d. h. die Anzahl von Integrationspunkten n_{GP}^e pro Element, festlegen.

sowie der Vektor mit Ansatzfunktionen $\mathbf{N}_{\Theta_q}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q}^e}$ zu definieren. Weiterhin resultieren an der Oberfläche $\gamma_q^h \cup \gamma_{\Theta_q}^h$ für die thermischen Feldvariablen die Interpolationsformeln

$$\Theta^h(\mathbf{x}^h, t)|_{\gamma_q^h \cup \gamma_{\Theta_q}^h} = \mathbf{N}_{\Theta_q}^{eT}(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \Theta^e(t) = \mathbf{N}_{\Theta_q}^{eT}(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \{ \mathbf{Z}_{\Theta_q}^e \Theta(t) + \bar{\mathbf{Z}}_{\Theta_q}^e \bar{\Theta}(t) \}, \quad (5.95)$$

$$\delta \Theta^h(\mathbf{x}^h)|_{\gamma_q^h \cup \gamma_{\Theta_q}^h} = \mathbf{N}_{\Theta_q}^{eT}(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \delta \Theta^e = \mathbf{N}_{\Theta_q}^{eT}(\phi_{ts}^e(\mathbf{x}^h)) \mathbf{Z}_{\Theta_q}^e \delta \Theta, \quad (5.96)$$

mit $\Theta^e = \{\Theta_1^e, \dots, \Theta_{\bar{n}_{\Theta_q}}^e\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q}^e}$, $\delta \Theta^e = \{\delta \Theta_1^e, \dots, \delta \Theta_{\bar{n}_{\Theta_q}}^e\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q}^e}$. Ergänzend hierzu gelten für die von der Gebietszerlegung der Struktur abgeleitete Oberflächendiskretisierung des thermischen Neumann-Randes die Aussagen (5.69), (5.71) und (5.72), sodass die isoparametrische Koordinatentransformation $\chi_{ts}^e: \Omega_{\square} \rightarrow \gamma^e$, $\xi \mapsto \mathbf{x}^h = \chi_{ts}^e(\xi)$ weiter zur Anwendung kommt.

Das Zusammenfassen der aufgestellten Ausdrücke (5.78), (5.82), (5.90) und (5.92) in

$$\begin{aligned} \delta \pi_{\Theta}^h(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \delta \mathbf{u}, t) &= \delta \Theta^T \left\{ \mathbf{C}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\Theta}(t) \right. \\ &\quad \left. + \bar{\mathbf{C}}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\bar{\Theta}}(t) + \mathbf{p}_{\kappa}(\mathbf{u}, \Theta, t) - \mathbf{p}_{r_{\Theta}}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) - \mathbf{p}_{\Theta_q}(\mathbf{u}, \Theta, t) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (5.97)$$

führt und unter Voraussetzung beliebiger virtueller Knotentemperaturen $\delta \Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q}}$ auf ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\mathbf{C}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\Theta}(t) = \mathbf{r}_{\Theta}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t), \quad (5.98)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{\Theta}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) &= -\bar{\mathbf{C}}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\bar{\Theta}}(t) \\ &\quad - \mathbf{p}_{\kappa}(\mathbf{u}, \Theta, t) + \mathbf{p}_{r_{\Theta}}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) + \mathbf{p}_{\Theta_q}(\mathbf{u}, \Theta, t) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q}}, \end{aligned} \quad (5.99)$$

zur Beschreibung der Temperaturevolution.

Das vollständige semidiskrete, thermomechanisch gekoppelte Anfangs-Randwertproblem, bestehend aus der diskretisierten Variationsformulierung der Impulsbilanz, der diskretisierten Form der Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen und der räumlich parametrisierten Wärmeleitungsgleichung, ist in Tab. 5.1 dargestellt. Die diskreten Anfangsbedingungen für die Primärfeldvariablen werden, anstatt die schwachen Formen (4.42) bis (4.44) in einer raumdiskretisierten Version explizit umzusetzen, durch die Ausdrücke

$$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \in \mathbb{R}^{n_{uu}}, \quad \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{v}_0 \in \mathbb{R}^{n_{uv}}, \quad \Theta(t_0) = \Theta_0 \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q}} \quad (5.100)$$

vereinfacht wiedergegeben. Für weitere Details hierzu sei auf [Hughes, 2000, S. 420–422] verwiesen.

Tabelle 5.1: Allgemeines semidiskretes thermomechanisch gekoppeltes Anfangs-Randwertproblem

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$, $\Theta(t)$ und $\mathbf{q}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semidiskrete ODE-System	
$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t),$	(5.75)
$\mathbf{C}_p(\mathbf{u}, \Theta, t)\dot{\Theta}(t) = \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t),$	(5.98)
$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t),$	(5.59)
mit den Anfangsbedingungen	
$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{v}_0, \quad \Theta(t_0) = \Theta_0, \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$	
zu lösen.	

Anmerkungen zur geometrisch linearen Theorie: Im Rahmen einer kinematisch linearen Betrachtung bleibt die Gleichungsstruktur des in Tab. 5.1 aufgeführten semidiskreten, thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems erhalten. Dennoch ergeben sich aufgrund der Angleichungen zwischen Koordinaten der Referenz- und Momentankonfiguration, der Dichte sowie der dynamischen Größen einige Änderungen, die es im Bereich kleiner Deformationen bei der Aufstellung von $\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t)$, $\mathbf{C}_p(\mathbf{u}, \Theta, t)$ und $\mathbf{r}_\Theta(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ zu berücksichtigen gilt. Die folgende Aufzählung gibt hierüber Auskunft.

- Wegen $\mathbf{x}^h \approx \mathbf{X}^h$ bzw. der approximierten Identität der Koordinatentransformationen $\chi_t^e(\xi) \approx \chi_R^e(\xi)$ und $\chi_{ts}^e(\xi) \approx \chi_{Rs}^e(\xi)$ findet eine Vereinheitlichung von Referenz- und Momentankonfiguration statt. Dies impliziert u. a. $\mathbf{j}^e(\xi) \approx \mathbf{J}^e(\xi)$, $\det \mathbf{j}^e(\xi) \approx \det \mathbf{J}^e(\xi)$ sowie $\mathbf{j}_s^e(\xi) \approx \mathbf{J}_s^e(\xi)$, $\det \mathbf{j}_s^e(\xi) \approx \det \mathbf{J}_s^e(\xi)$. Darüber hinaus ergeben sich im Rahmen der geometrisch linearen Theorie die folgenden Approximationen: $\mathbf{F}^e \approx \mathbf{I}$, $\det \mathbf{F}^e \approx 1$, $\mathbf{F}_{23}^e = \mathbf{I}_6 \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$, $\text{grad } N_a \approx \text{Grad } N_a$, $\mathbf{B}_u^e(\xi) \approx \tilde{\mathbf{B}}_u^e(\xi)$, $\det \mathbf{j}^e(\xi) \approx \det \mathbf{J}^e(\xi)$ und $\det \mathbf{j}_s^e(\xi) \approx \det \mathbf{J}_s^e(\xi)$
- Die im Bereich kleiner Deformationen gültige Annahme von Totlasten, siehe Abschnitt 4.1, ignorieren eine Deformationsabhängigkeit von \mathbf{t}^e , f_q^e und $f_{\Theta q}$, sodass aus Gl. (5.68) der oberflächenverteilte Lastvektor $\mathbf{f}_{\text{ext} \delta \mathcal{B}}(t)$ resultiert und aus Gl. (5.93) der oberflächenverteilte Wärmeflussvektor $\mathbf{p}_{\Theta q}(\Theta, t)$ hervorgeht. Auch die Konduktivitätsmatrizen $\mathbf{C}_\kappa(\Theta, t)$ und $\overline{\mathbf{C}}_\kappa(\Theta, t)$, siehe Gl. (5.88) und (5.89), werden infolge der geometrischen Linearisierung nicht mehr deformationsabhängig modelliert.
- Eine Unterscheidung der Massendichten von Referenz- und Momentankonfiguration entfällt, sodass wegen $\varrho_R^e(\mathbf{X}^h) \approx \varrho^e(\mathbf{x}^h)$ in den Ausdrücken (5.61), (5.62), (5.66), (5.80), (5.81) und (5.91) $\varrho_R^e(\mathbf{X}^h)$ auch durch $\varrho^e(\mathbf{x}^h)$ ersetzt werden kann.

- Der unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften des geometrisch linearisierten Verzerrungstensors hervorgehende Spaltenvektor $\mathbf{E}_L \approx \mathbf{E} \approx \text{sym} \delta \mathbf{h}$ berechnet sich zu $\mathbf{E}_L^e = \{E_{L11}, E_{L22}, E_{L33}, 2E_{L12}, 2E_{L23}, 2E_{L31}\}^T = \mathbf{B}_u^e \mathbf{u}^e \in \mathbb{R}^6$. An die Stelle der in vielen Materialfunktionen zu berücksichtigenden Deformationsabhängigkeit, die im Rahmen der geometrischen Nichtlinearität durch die Determinante des Deformationsgradienten modelliert wurde, tritt die Volumendehnung $\text{tr} \mathbf{E}_L^e = \mathbf{e}^T \mathbf{B}_u^e \mathbf{u}^e$, mit $\mathbf{e} = \{1, 1, 1, 0, 0, 0\}^T \in \mathbb{R}^6$.
- Zur Abgrenzung von geometrisch nichtlinearen Konstitutivmodellen werden Materialmodelle für den infinitesimalen Verzerrungsbereich durch die allgemeinen impliziten Stofffunktionale

$$\mathbf{T}^e = \mathbf{h}^e(\mathbf{E}_L^e, \hat{\Theta}^e, \hat{\mathbf{q}}^e) \quad (5.101)$$

$$\hat{\mathbf{q}}^e = \mathbf{r}^e(\mathbf{E}_L^e, \hat{\Theta}^e, \mathbf{q}^e) \quad (5.102)$$

abgebildet. Darüber hinaus seien infolge der Anpassung der Kinematik die thermomechanischen Materialfunktionen für die Wärmekapazität und den Produktionsterm durch die folgenden allgemeinen Ausdrücke

$$c_p^e(\mathbf{X}^h, t) = \hat{c}_p^e(\text{tr} \mathbf{E}_L^e, \hat{\Theta}^e) \quad \text{und} \quad p_\Theta^e(\mathbf{X}^h, t) = \hat{p}_\Theta^e(\mathbf{E}_L^e, \dot{\mathbf{E}}_L^e, \hat{\Theta}^e, \dot{\hat{\Theta}}^e, \mathbf{q}^e, \dot{\mathbf{q}}^e) \quad (5.103)$$

charakterisiert.

- Ein weiteres Resultat der kinematischen Vereinheitlichung ist gemäß Gl. (5.53)₂ die innerhalb der geometrisch linearen Theorie gültige Approximation $\mathbf{T}^e \approx \hat{\mathbf{T}}^e$.

Unter Beachtung der aufgeführten Punkte bleiben sämtliche in diesem Abschnitt mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode angegebenen Ausdrücke auch für eine geometrisch lineare Theorie gültig.

Reduzierte semidiskrete Systeme: Neben thermomechanisch gekoppelten, dynamischen Analysen werden an entsprechenden Stellen in der vorliegenden Arbeit auch statische bzw. quasistatische Prozesse betrachtet. Das Vernachlässigen der Trägheitskräfte, d. h. $\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0}$ und $\bar{\mathbf{M}}\ddot{\bar{\mathbf{u}}}(t) = \mathbf{0}$, in der semidiskreten Bewegungsgleichung (5.75) führt dann auf das in Tab. 5.2 formulierte Differential-Algebraische Gleichungssystem (DAE-System). Auch wenn der Wegfall der Beschleunigungsterme einen Teil des zeitabhängigen Systemverhaltens eliminiert, manifestieren sich jedoch weiterhin transiente Effekte infolge der instationären Wärmeleitungsgleichung (5.98) oder den Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen (5.59). Derartige semi-explizite DAE-Systeme zur Beschreibung von thermomechanisch gekoppelten quasistatischen Prozessen wurden beispielsweise in den Arbeiten von Hartmann et al. [2009b], Quint [2012], Hamkar [2013], Netz [2013], Al-Kinani [2014], Rothe et al. [2015a] und Netz und Hartmann [2015] behandelt. Es ist hervorzuheben, dass die Bestimmung konsistenter Anfangsbedingungen \mathbf{u}_0 , Θ_0 und \mathbf{q}_0 , welche bereits a priori zum Zeitpunkt $t = t_0$ die algebraische Zwangsbedingung (5.105) erfüllen, mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden sein kann. Bezugnehmend auf das

Tabelle 5.2: Semidiskretes, thermomechanisch gekoppeltes Anfangs-Randwertproblem für quasistatische Prozesse (5.104)

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$, $\Theta(t)$ und $\mathbf{q}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semidiskrete DAE-System	
$\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) = \mathbf{0},$	(5.105)
$\mathbf{C}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\Theta}(t) = \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t),$	(5.98)
$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t),$	(5.59)
mit den konsistenten Anfangsbedingungen	
$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad \Theta(t_0) = \Theta_0, \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$	
zu lösen.	

System aus Tab. 5.2 plädieren Strehmel et al. [2012, S.416] für eine Vorgabe der Anfangswertvektoren $\Theta_0 \in \mathbb{R}^{n_\Theta}$ und $\mathbf{q}_0 \in \mathbb{R}^{n_Q}$ für die differentiellen Variablen mit denen anschließend der Anfangswertvektor $\mathbf{u}_0 \in \mathbb{R}^{n_u}$ für die algebraischen Variablen aus der Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems

$$\mathbf{g}_u(\mathbf{u}_0, \Theta_0, \mathbf{q}_0, t_0) = \mathbf{0}$$

ermittelt werden kann. Für eine umfassendere allgemeinere Darstellung zur Theorie Differential-Algebraischer Gleichungssysteme sei der interessierte Leser auf [Hairer et al., 1989; Strehmel et al., 2012] verwiesen.

Um grundlegende Charakteristika der in der vorliegenden Arbeit behandelten Verfahren aufzuzeigen, werden auch rein mechanische, quasistatische und strukturdynamische Problemstellungen betrachtet. Die Tabellen 5.3 und 5.4 fassen die unter Ausblendung einer Temperaturabhängigkeit hervorgehenden semidiskreten Systemgleichungen zusammen. Wird in einer weiteren Reduktionsstufe auch sämtliches inelastisches Materialverhalten ausgegrenzt, resultieren Problemstellungen aus dem Bereich der stationären Elastostatik und transienten Elastodynamik. Die zugehörigen semidiskreten Gleichungsstrukturen zeigen die Tab. 5.5 und 5.6.

Tabelle 5.3: Semidiskretes Anfangs-Randwertproblem der Strukturdynamik mit inelastischen Konstitutivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$ und $\mathbf{q}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semidiskrete ODE-System
$\begin{aligned} \mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) &= -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t), \\ \dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t), \end{aligned}$
mit den Anfangsbedingungen
$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{v}_0, \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$
zu lösen.

Tabelle 5.4: Semidiskretes Anfangs-Randwertproblem für quasistatische Prozesse mit inelastischen Konstitutivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$ und $\mathbf{q}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semidiskrete DAE-System
$\begin{aligned} \mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) &= \mathbf{0}, \\ \dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t), \end{aligned}$
mit den konsistenten Anfangsbedingungen
$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \quad \text{und} \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$
zu lösen.

Tabelle 5.5: Semidiskretes Anfangs-Randwertproblem der Elastodynamik

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semidiskrete ODE-System

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, t) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\bar{\mathbf{u}}}(t)$$

mit den Anfangsbedingungen

$$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \quad \text{und} \quad \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{v}_0$$

zu lösen.

Tabelle 5.6: Semidiskretes algebraisches Gleichungssystem der Elastostatik

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das algebraische Gleichungssystem

$$\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, t) = \mathbf{0}$$

zu lösen.

5.2 Zeitdiskretisierung

Im vorausgegangenen Abschnitt wurde zur Raumdiskretisierung eine isoparametrische Finite-Elemente-Formulierung vorgestellt. Hieran schließt sich in diesem Abschnitt die Beschreibung der Zeitdiskretisierung an. Der nachfolgende Überblick über diverse Zeitintegrationsverfahren dient dazu, die in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden Algorithmen entsprechend einzuordnen und auf Komplikationen und Anforderungen an eine robuste Zeitdiskretisierung im Zusammenhang mit nichtlinearen Problemstellungen hinzuweisen.

Der numerischen Zeitintegration von aus der Raumdiskretisierung hervorgehenden Differentialgleichungssystemen (ODE-System) und Algebro-Differentialgleichungssystemen (DAE-System) wurde in den letzten Jahrzehnten innerhalb der numerischen Mathematik große Aufmerksamkeit gewidmet. In den Standardwerken [Hairer et al., 1993] und [Hairer und Wanner, 1996] werden Algorithmen für ODE- und DAE-Systeme mit unterschiedlichen Eigenschaften intensiv behandelt. Aus der deutschsprachigen Literatur ist z. B. das Buch von Strehmel et al. [2012] zu nennen, welches einen umfassenden Überblick zu diesem Themenkomplex gibt.

Ein bedeutsamer, positiver Aspekt der sequentiellen Raum-Zeitdiskretisierung liegt darin begründet, dass zunächst die gesamte Vielfalt an numerischen Zeitintegrationsverfahren zur Verfügung steht. Um jedoch Aussagen über die Eignung spezieller Integratoren zu treffen, sollte eine Analyse der Eigenschaften des semidiskreten Systems unter Berücksichtigung der involvierten geometrischen und physikalischen Nichtlinearitäten vorausgehen.

In den letzten Jahren sind zahlreiche Anstrengungen unternommen worden, robuste Verfahren zur Lösung steifer Differentialgleichungs- und Algebro-Differentialgleichungssysteme, die als Grenzfall eines steifen Systems aufgefasst werden können, siehe hierzu [Hairer et al., 1988; Hairer et al., 1989], zu entwickeln. Prinzipiell lassen sich die Algorithmen in Einschritt- und Mehrschrittverfahren unterscheiden. Erstere sind Integratoren, bei denen die numerische Näherung zur Zeit t_{n+1} lediglich von der Lösung des vorhergehenden Zeitpunktes t_n abhängt. Mehrschrittverfahren greifen hingegen beim diskreten Voranschreiten in der Zeit von t_n nach t_{n+1} auf Approximationen an vorausgehenden Zeitschritten t_{n-k} , $k \geq 1$, zurück. Problematisch gestaltet sich hierbei zumeist die Initialisierungsprozedur, da zum Anfangszeitpunkt t_0 noch keine Startwerte für t_{n-k} , $k \geq 1$, vorliegen. Ein weiteres Klassifizierungskriterium nimmt eine Einteilung in explizite und implizite Schemata vor,²⁷ wobei Verfahren aus der zuerst genannten Kategorie eine direkte Extrapolation der numerischen Lösung zur Zeit t_{n+1} aus bereits bekannten Systemgrößen ohne eine zusätzlich aufwendige iterative Lösungsprozedur erlauben. Allerdings sind explizite Verfahren²⁸ nur bedingt stabil und daher an erhebliche Restriktionen bezüglich der Schrittweite gebunden.²⁹ Explizite Verfahren werden häufig zur Simulation

²⁷Weiterhin werden in der Praxis auch Kombinationen eines expliziten und impliziten Verfahrens eingesetzt. Beispielsweise finden in [Rothe et al., 2012] sogenannte halbexplizite Runge-Kutta Verfahren Anwendung.

²⁸Explizite Zeitintegrationsverfahren werden vorzugsweise beim Vorhandensein massiver Nichtlinearitäten eingesetzt. Ein weit verbreitetes populär-wissenschaftliches Anwendungsgebiet aus dem Bereich der nichtlinearen Strukturdynamik ist die Durchführung von Fahrzeugcrash-Analysen.

²⁹Die Eigenschaft der bedingten Stabilität impliziert, dass die numerische Lösung über alle Grenzen

von hochfrequenten Wellenausbreitungsphänomenen herangezogen, welche beispielsweise nach impulsartigen Stoßvorgängen auftreten. In der vorliegenden Monographie werden ausschließlich implizite Einschritt-Zeitintegrationsverfahren betrachtet. Aufgrund der diesen Methoden zumeist zugesprochenen Eigenschaft der unbedingten Stabilität können Restriktionen an die Schrittweite ausgeschlossen werden. Bedingt durch die implizite Struktur der Verfahrensvorschrift verlagert sich allerdings im Allgemeinen nun der Aufwand auf die zu lösenden nichtlinearen Gleichungssysteme. Infolgedessen bedarf es im Rahmen einer inkrementell iterativen Lösungsprozedur der Bereitstellung der Funktionalmatrix des räumlich und zeitlich diskretisierten Systems. Implizite Einschrittverfahren, wie z. B. implizite Runge-Kutta Methoden (RK-Verfahren) oder linear-implizite Rosenbrock Verfahren,³⁰ sind umfangreich bei Problemstellungen mit Konstitutivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp erfolgreich in den Arbeiten von Fritzen [1997], Ellsiepen [1999], Ellsiepen und Hartmann [2001], Hartmann [2002], Hartmann [2003], Hartmann [2005], Hartmann und Wensch [2007], Hartmann et al. [2008b], Hartmann und Bier [2008], Hartmann et al. [2008a], Hartmann et al. [2009b], Hartmann et al. [2009a], Hartmann und Hamkar [2010], Quint et al. [2011], Quint [2012], Rothe et al. [2012], Hamkar [2013], Netz [2013], Netz und Hartmann [2015], Erbts et al. [2015], Rothe et al. [2015a] und Grafenhorst et al. [2017] behandelt worden.

Die bedeutendste Klasse der Einschrittverfahren zur numerischen Integration von nichtlinearen steifen Differentialgleichungen und Differential-Algebraischen Gleichungssystemen sind die in den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 vorgestellten impliziten Runge-Kutta Verfahren, wobei der Fokus auf der Betrachtung von diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) liegen wird. In [Hairer und Wanner, 1996] und [Strehmel et al., 2012] werden diese Integratoren ausführlich diskutiert. RK-Verfahren zeichnen sich dadurch aus, dass durch bestimmte Freiheiten bei der algorithmischen Parameterwahl sehr verschiedene Methoden generierbar sind, die mit dem zu behandelnden Problem harmonisiert werden können. Insbesondere ist es so möglich, unterschiedliche Stabilitätsanforderungen in ein Verfahren einzuarbeiten. Zur Anwendung der RK-Verfahren auf das semidiskrete System aus Tab. 5.1 bzw. auf die semidiskrete Bewegungsgleichung (5.75) muss dieses zunächst auf ein reines ODE-System erster Ordnung transformiert werden, sodass in diesem Zusammenhang auch von einem indirekten Zeitintegrationsverfahren gesprochen wird. Wie bereits Owren und Simonsen [1995] in ersten Untersuchungen an linearen dynamischen Systemen gezeigt haben, verfügen repräsentative Vertreter der SDIRK-Verfahrensklasse, siehe³¹ [Alexander, 1977; Cash, 1979], über bessere Genauigkeits- und Stabilitätseigenschaften als die von Hilber et al. [1977] entwickelte HHT- α -Methode, die ein Derivat aus der Newmark-Familie darstellt.

Im Bereich der Strukturodynamik kommen zur Zeitdiskretisierung der semidiskreten dynamischen Gleichgewichtsbedingung (5.75) seit Langem auch direkte Methoden mit

anwächst (Stabilitätsversagen), falls eine kritische Zeitschrittweite überschritten wird, siehe hierzu z. B. [Hughes, 2000, S. 465–467].

³⁰Im Gegensatz zu impliziten Runge-Kutta Methoden erfordern Rosenbrock-Typ Verfahren in jedem Integrationsschritt nur die Lösung linearer Gleichungssysteme, siehe hierzu z. B. [Hartmann und Wensch, 2007; Hartmann und Hamkar, 2010; Hamkar, 2013] und die dort zitierte Literatur.

³¹SDIRK-Verfahren kennzeichnen sogenannte einfach diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren. Für weitere Details wird auf Abschnitt 5.2.1 verwiesen.

Erfolg zum Einsatz. Als repräsentative Vertreter seien die Newmark- β Methode [Newmark, 1959], die HHT- α -Methode [Hilber et al., 1977], die WBZ- α -Methode [Wood et al., 1980] und die in Abschnitt 5.2.4 aufgegriffene Generalized- α Methode [Chung und Hulbert, 1993] genannt, von der alle zuvor genannten Integratorfamilien durch entsprechende Wahl der algorithmischen Parameter abgeleitet werden können. Neben einer temporalen Konvergenzrate zweiter Ordnung und unbedingter Stabilität verfügt die Generalized- α Methode über die herausragende Eigenschaft einer kontrollierbaren numerischen bzw. algorithmischen Dämpfung. Dieser Mechanismus hilft hochfrequente Schwingungsmoden, welche nur unzureichend entweder durch die Raumdiskretisierung, die gewählte Zeitschrittweite oder die von Kombination Raum- und Zeitdiskretisierung aufgelöst werden können, zu eliminieren. Zudem kann anhand des von Belytschko und Schoeberle [1975] vorgeschlagenen Kriteriums der energetischen Stabilität³² gezeigt werden, dass die algorithmische Dissipation die numerische Stabilität der Generalized- α Methode sicherstellt. Durch die sukzessive Annihilation von Energie aus dem System können jedoch nur unbefriedigende Ergebnisse bei der Berechnung von langzeitdynamischen Prozessen erzielt werden. Für weiterführende Analysen und Anwendungen zur Generalized- α Methode im Bereich der nichtlinearen Strukturmechanik sei exemplarisch auf [Chung und Hulbert, 1993; Kuhl, 1996; Erlicher et al., 2002] verwiesen. Einen anderen Einsatzbereich haben die Generalized- α Methode oder zumindest die hiervon abgeleiteten Derivate mit Blick auf die Behandlung von DAE-Systemen erschließen können. Im Rahmen der Reaktionskraftberechnung, siehe hierzu auch [Hartmann et al., 2008b], von strukturmechanischen Systemen mittels der Lagrange-Multiplikator-Methode werden von Lunk und Simeon [2006], Negut und Laurent [2007] und Arnold und Brüls [2007] kinematische Nebenbedingungen ohne Reduktion der temporalen Genauigkeitsordnung in die Zeitdiskretisierungsprozedur eingebettet. Zur Vervollständigung der Semidiskretisierung des thermomechanisch gekoppelten Problems aus Tab. 5.1 mit der Generalized- α Methode, d. h. zur Partitionierung der semidiskreten Wärmeleitungsgleichung (5.98) und der Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen (5.59) in der Zeit, findet die als implizites Einschrittverfahren formulierte Generalized- α Methode für ODE-Systeme erster Ordnung Anwendung, siehe [Jansen et al., 2000; Dettmer und Perić, 2003; Rang, 2013a; Rang, 2013b].

Obwohl nicht im Fokus dieser Arbeit soll ein kurzer Ausblick auf sogenannte energie- und impulserhaltende Integrationsverfahren im Bereich der Dynamik gegeben werden. Für einen umfassenden Überblick zu diesem Themenkomplex sei auf [Simo und Wong, 1991; Simo und Tarnow, 1992; Simo et al., 1992; Tarnow, 1993; Lewis und Simo, 1994; Kuhl und Crisfield, 1999; Kuhl und Ramm, 1999; Kuhl und Ramm, 2000; Gonzalez, 2000; Betsch

³²Zur Beurteilung der numerischen Stabilität im Bereich der geometrisch nichtlinearen Strukturmechanik eignet sich das von Belytschko und Schoeberle [1975] vorgeschlagene Kriterium der energetischen Stabilität. Nach dieser allgemeingültigen Definition ist ein Integrator genau dann numerisch stabil, wenn die Energiebilanz innerhalb eines Zeitschritts erfüllt ist oder Energie numerisch dissipiert wird. Zum Ausschluss eines Stabilitätsversagens wird im Fall der linearen Dynamik häufig die spektrale Stabilitätsanalyse, siehe z. B. [Bathe und Wilson, 1972; Goudreau und Taylor, 1973; Hughes, 1983; Hughes, 2000], herangezogen. Wie jedoch zahlreiche Autoren u. a. Park [1975], Wood und Oduor [1988], Simo und Tarnow [1992] und Kuhl und Ramm [1996] zeigen, können die Stabilitätseigenschaften der Verfahren für lineare Probleme nicht zwangsläufig auf nichtlineare Systeme übertragen werden.

und Steinmann, 2001; Groß, 2004; Groß und Betsch, 2011] und die dort zitierte Literatur referiert. Während die meisten Integrationsverfahren die Konservierung der relevanten Größen wie Energie, Impuls und Drehimpuls a priori nicht garantieren, findet bei den energie- und impulserhaltenden Schemata eine Berücksichtigung der algorithmischen Konservierung dieser Systeminvarianten bereits bei der Konstruktion statt. Als einer der populärsten Vertreter dieser Klasse sei die „Energy-Momentum-Method“ (EMM) von Simo und Tarnow [1992] genannt, welche neben der Erhaltung der totalen Energie auch die Erhaltung der Impulsabbildungen innerhalb eines Zeitschritts garantiert. Die EMM-Methode, die aus einer einfachen Modifikation der Mittelpunktsregel hervorgeht, wurde in [Simo und Tarnow, 1994; Crisfield und Shi, 1994; Simo et al., 1995; Crisfield und Shi, 1996; Galvanetto und Crisfield, 1996; Crisfield et al., 1997; Armero und Petőcz, 1996; Armero und Petőcz, 1998; Armero und Petőcz, 1999; Gonzalez, 2000; Miehe und Schröder, 2001] angewendet bzw. weiterentwickelt und in [Kuhl und Crisfield, 1999; Kuhl und Ramm, 1999; Kuhl und Ramm, 2000] auf Basis der Generalized- α Methode zur „generalized energy-momentum method“ (GEMM) mit der Möglichkeit einer zusätzlich einstellbaren numerischen Dissipation erweitert. Hierauf aufbauend wurde von Romero [2009], Romero [2010a] und Romero [2010b] ein allgemeines Konzept zur Konstruktion von sogenannten thermodynamisch konsistenten Zeitintegrationsverfahren, die bereits beim Entwurf des Integrators die diskretisierten thermodynamischen Naturgesetze³³ und andere zugrunde liegenden Symmetrien automatisch erfüllen, vorgestellt. Das Grundgerüst für diese Verallgemeinerung bildete die von Grmela und Öttinger [1997], Öttinger und Grmela [1997] und Öttinger [2005] eingeführte GENERIC-Formulierung,³⁴ welche die kontinuumsmechanisch motivierten Entwicklungsgleichungen eines thermodynamischen Systems in reversible und irreversible Anteile aufspaltet, siehe auch [Mielke, 2011]. Während der reversible Beitrag mit der Ableitung der totalen Energie in Verbindung steht, assoziiert das irreversible Kontingent die Ableitung der totalen Entropie. Für den Spezialfall eines vollständig reversiblen mechanischen Systems geht die GENERIC-Darstellung in die Hamiltonische Dynamik über. Weiterhin basiert die Konstruktion eines EEM-Integrators auf der Verwendung eines speziellen, auf dem Mittelpunkt des Zeitinkrements ausgewerteten, diskreten Gradientenoperators, der die Eigenschaften Direktionalität und Konsistenz sicherstellt, siehe hierzu [Gonzalez, 1996; Gonzalez, 2000; Conde Martín, 2016]. Das Resultat der Kombination aus zeitdiskretisierter GENERIC-Gleichungsstruktur vom Mittelpunktstyp und dem diskreten Ableitungsoperator sind kanonisch strukturerhaltende Zeitintegrationsverfahren zweiter Ordnung. Für weitere Erklärungen sei auf die Arbeiten von Groß und Betsch [2009], Romero [2009], Romero [2010a], Romero [2010b], Krüger et al. [2011], Groß und Betsch [2011], Krüger [2012], Gonzalez-Ferreiro et al. [2014], Conde Martín et al. [2016] und Krüger et al. [2016] und die dort zitierte Literatur verwiesen. Im Vergleich zu den traditionellen Integratoren verlangen die strukturerhaltenden Verfahren nach erheblichen Anpassungen auf Elementebene, was

³³Die thermodynamisch konsistenten Integratoren werden auch als „energy-entropy-momentum methods“ (EEM-Methoden) bezeichnet, da sie, angewendet auf ein geschlossenes thermodynamisches System, energie- und impulserhaltend sowie entropieproduzierend operieren.

³⁴Das Akronym GENERIC bezeichnet in der englischsprachigen Literatur „General Equilibrium Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling“, eine spezielle metriplektische Struktur der zugrunde liegenden Systemgleichungen im Bereich der Physik oder Ingenieurwissenschaften.

sich verständlicherweise negativ auf die numerische Effizienz auswirkt.

Eine alternativer Ansatz versucht unter Verwendung eines zumeist numerisch dissipativen Basisalgorithmus die Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung innerhalb eines Zeitschritts für ein mechanisches System über zusätzliche algebraische Nebenbedingungen zu erzwingen, siehe hierzu [Hughes et al., 1978; Kuhl und Ramm, 1996; Kuhl, 1996].³⁵

In Abschnitt D.4 wird basierend auf den Arbeiten von Shampine [1999], Hairer et al. [2006] und Hartmann et al. [2008a] ein Geometrieorientiertes Konzept der numerischen Zeitintegration („geometric numerical integration“) präsentiert, das die Energieerhaltung als nachgeschalteten Projektionsschritt einbezieht.

5.2.1 Verfahrensvorschrift für DIRK-Verfahren

Die Herleitung der Verfahrensvorschrift für die diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) erfolgt zunächst anhand der Betrachtung eines expliziten Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODE-System) erster Ordnung

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \quad t \in [t_0, t_e], \quad (5.106)$$

mit der Systemdimension m . Zur Konstruktion einer approximierten Lösung des Anfangswertproblems (5.106) wird das gesamte betrachtete Zeitintervall $t \in [t_0, t_e]$ in eine aufsteigende Serie von $N + 1$ diskreten Zeitpunkten $t_0 < t_1 < \dots < t_n < t_{n+1} < \dots < t_N = t_e$ zerlegt, die zudem N Unterintervalle $[t_n, t_{n+1}]$, $n = 0, \dots, N - 1$, definieren. Die Differenz zwischen zwei aufeinander folgenden Punkten markiert den Zeitschritt $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$, $n = 0, \dots, N - 1$. Die Näherung zum Zeitpunkt t_n , $n > 0$, soll fortan mit $\mathbf{y}_n \approx \mathbf{y}(t_n)$ gekennzeichnet werden. Für $n = 0$ gilt die Identität $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$, die durch die Anfangsbedingungen $\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^m$ induziert wird.

Als Vorlage zur Entwicklung der Verfahrensvorschrift für die diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren dient der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_{n+1}) &= \mathbf{y}(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\mathbf{y}}(t) \, dt \\ &= \mathbf{y}(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \, dt = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \int_0^1 \mathbf{f}(t_n + \tau \Delta t_n, \mathbf{y}(t_n + \tau \Delta t_n)) \, d\tau, \end{aligned} \quad (5.107)$$

welcher durch Substitution der Ableitung $\dot{\mathbf{y}}(t)$ mit Hilfe der Differentialgleichung (5.106) die exakte Lösung $\mathbf{y}(t_{n+1})$ am Ende des Zeitintervalls aus $\mathbf{y}(t_n)$ generiert. Unter Ausnutzung der Transformation $t = t_n + \tau \Delta t_n$ wird der Integralausdruck auf das Einheitsgebiet

³⁵Zur Stabilisierung der Generalized- α Methode als Basisalgorithmus wird dieser in [Kuhl und Ramm, 1996; Kuhl, 1996] durch die Erfüllung der Nebenbedingungen der Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung erweitert. Der als „constraint energy momentum algorithm“ bezeichnete Integrationsalgorithmus bindet mit Hilfe der Lagrange-Multiplikator-Methode die algebraischen Nebenbedingungen in das Stationaritätsproblem der zugehörigen effektiven Strukturgleichung ein.

$0 \leq \tau \leq 1$ transformiert. Die Auswertung des Integrals auf der rechten Seite erfolgt nun näherungsweise durch eine s -stufige Quadraturformel

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) \approx \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}(T_{ni}, \mathbf{y}(t_n + c_i \Delta t_n)), \quad (5.108)$$

mit

$$T_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n, \quad i = 1, \dots, s, \quad (5.109)$$

den Wichtungsfaktoren b_i , $i = 1, \dots, s$, den im Einheitsgebiet definierten Stützstellen c_i , $i = 1, \dots, s$, sowie der Approximation $\mathbf{y}_n \approx \mathbf{y}(t_n)$. Der Index ni wird im Folgenden zur Kennzeichnung von Größen der i -ten Stufen zum Zeitpunkt T_{ni} verwendet. In einem weiteren numerischen Integrationsschritt gelingt es, die unbekannten Zwischenwerte $\mathbf{y}(t_n + c_i \Delta t_n)$ durch

$$\mathbf{y}(t_n + c_i \Delta t_n) \approx \mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{f}(T_{nj}, \mathbf{Y}_{nj}) \quad (5.110)$$

zu substituieren. Fortan bekommen die Größen \mathbf{Y}_{ni} , $i = 1, \dots, s$, die Bezeichnung Stufenwert zugewiesen. Um die Involvierung zusätzlicher Unbekannter zu vermeiden, werden identische Quadraturpunkte c_j , $j = 1, \dots, s$, verwendet, jedoch unterschiedliche Wichtungsfaktoren a_{ij} für $i = 1, \dots, s$ und $j = 1, \dots, s$ eingeführt. Der in der Summe von Gl. (5.110) auftretende Ausdruck

$$\dot{\mathbf{Y}}_{nj} = \mathbf{f}(T_{nj}, \mathbf{Y}_{nj}), \quad (5.111)$$

welcher den diskreten Wert der Differentialgleichung (5.106) repräsentiert, wird als Steigungswert bzw. Stufenableitung bezeichnet. Mit dieser Definition kann Gl. (5.110) zu

$$\mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \quad (5.112)$$

umgeschrieben werden.

Aufgrund einer Vielzahl von Parameterkombinationen, wobei die Koeffizienten hinsichtlich Effizienz, Stabilität und Genauigkeit definiert werden, siehe hierzu [Hairer et al., 1993; Hairer und Wanner, 1996; Butcher, 2008; Strehmel et al., 2012], ist es zweckmäßig, die Wichtungsfaktoren a_{ij} und b_i sowie die Stützstellen c_i in einem sogenannten Butcher-Tableau entsprechend Abb. 5.4 zusammenzufassen. Solch eine Schematisierung gestattet es, eine Klassifizierung in unterschiedliche Runge-Kutta Verfahrensklassen vorzunehmen. Ein s -stufiges vollimplizites Runge-Kutta Verfahren (IRK) liegt vor, falls die obere Dreiecksmatrix der Wichtungsmatrix $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ zumindest einen von Null verschiedenen Eintrag enthält, d. h. mindestens ein $a_{ij} \neq 0$ für $j > i$. Das Hauptdefizit solch eines Verfahrens ist, dass infolge einer Kopplung aller Stufenwerte \mathbf{Y}_{ni} , $i = 1, \dots, s$, ein nichtlineares Gleichungssystem der Dimension $m \times s$ gelöst werden muss. Der Berechnungsaufwand für die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems, besonders bei großen Dimensionen m , ist hoch und stellt einen klaren Nachteil im Vergleich zu anderen Einschrittverfahren dar.

c_1	a_{11}	a_{12}	\dots	a_{1s}	c_1	a_{11}	0	\dots	0	$\begin{array}{c c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array}$
c_2	a_{21}	a_{22}	\dots	a_{2s}	c_2	a_{21}	a_{22}	\dots	0	
\vdots	\vdots		\ddots	\vdots	\vdots	\vdots		\ddots	0	
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	a_{ss}	c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	a_{ss}	
	b_1	b_2	\dots	b_s		b_1	b_2	\dots	b_s	

(a) IRK-Verfahren
(b) DIRK-Verfahren
(c) Kompakte Darstellung

Abbildung 5.4: Butcher-Tableaus für Runge-Kutta Verfahren

Bei expliziten Runge-Kutta Verfahren repräsentiert die Wichtungsmatrix eine strikte untere Dreiecksmatrix, d. h. $a_{ij} = 0$ für $j \geq i$, sodass die Stufenwerte \mathbf{Y}_{ni} , $i = 1, \dots, s$, zumeist durch einfache Funktionsauswertungen von Gl. (5.110) sukzessive aus bekannten Größen berechnet werden können. Allerdings erfüllen diese Verfahren keine geeigneten Stabilitätskriterien und sind darüber hinaus an eine ziemlich stringente Limitierung des Zeitschritts gebunden, welche eine erhebliche Einschränkung an die praxisnahen Anwendungen mit sich bringt. Um dennoch die hervorragenden Stabilitätseigenschaften von IRK-Methoden und eine gleichzeitige Entkopplung der Stufengrößen zu erhalten, sind in der vorliegenden Arbeit sogenannte diagonal-implizite Runge-Kutta Methoden (DIRK) von Interesse. Für diese Zeitintegratoren nimmt gemäß Abb. 5.4b \mathbf{A} die Gestalt einer unteren Dreiecksmatrix an, bei der sämtliche Einträge oberhalb der Hauptdiagonalen Null sind. Die Eigenschaft der Diagonalimplizitheit $a_{ij} = 0$ für $j > i$ veranlasst eine Reduktion der Berechnungsvorschrift (5.112) zu

$$\mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^i a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} = \mathbf{Y}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \quad (5.113)$$

mit dem in jeder Stufe i , $i = 1, \dots, s$, bekannten Startwert

$$\mathbf{Y}_{ni}^S = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj}, \quad (5.114)$$

welcher lediglich von der Näherungslösung des vorhergehenden Zeitpunktes \mathbf{y}_n und bereits berechneten Stufenableitungen $\dot{\mathbf{Y}}_{nj}$, $j = 1, \dots, i-1$, abhängt. Die hierdurch initiierte Entkopplung in den Stufengrößen führt in jeder Stufe i , $i = 1, \dots, s$, unter Berücksichtigung von Definition (5.111) auf die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems

$$\mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{Y}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \mathbf{f}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}). \quad (5.115)$$

Mit der Wahl von DIRK-Methoden müssen also im Vergleich zu IRK-Verfahren in jedem Zeitschritt Δt_n nur noch eine Sequenz von s aufeinander folgenden nichtlinearen Gleichungssystemen (5.115) der Dimension m gelöst werden, wodurch der numerische Aufwand signifikant sinkt. Um die Berechnungen innerhalb einer Stufe abzuschließen,

resultiert aus der Umstellung von Gl. (5.113) die Stufenableitung

$$\dot{\mathbf{Y}}_{ni} = \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{Y}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}}. \quad (5.116)$$

Es ist einfach einzusehen, dass infolge des linearen Zusammenhangs (5.112) auch eine Aufstellung des nichtlinearen Gleichungssystems in Bezug auf die Steigungswerte $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}$, $i = 1, \dots, s$, möglich ist. Dies führt für ein DIRK-Verfahren auf

$$\dot{\mathbf{Y}}_{ni} = \mathbf{f}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{Y}}_{ni}), \quad (5.117)$$

wobei der Berechnungszyklus einer Stufe zur Präzisierung von \mathbf{Y}_{ni} nun durch Gl. (5.113) komplettiert wird.

Nach Bestimmung aller Stufenableitungen $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}$, $i = 1, \dots, s$, ergibt sich die gesuchte Näherungslösung zum nächsten Zeitpunkt t_{n+1} gemäß Gl. (5.108) zu

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Y}}_{ni}. \quad (5.118)$$

Zusätzlich sollen in der vorliegenden Monographie ausschließlich sogenannte steif-genaue DIRK-Verfahren zum Einsatz kommen. Diese zeichnen sich durch Einhaltung der steif-genauen Eigenschaft nach Prothero und Robinson [1974] durch eine nicht-singuläre Koeffizientenmatrix \mathbf{A} sowie die Bedingungen $c_s = 1$ und $a_{sj} = b_j$, $j = 1, \dots, s$, aus, sodass der letzte Berechnungsschritt (5.118) entfällt. In diesem Fall gilt $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{Y}_{ns}$. Darüber hinaus wird die Wahl der Koeffizienten für \mathbf{A} durch identische Diagonaleinträge, d. h. $a_{ii} = \gamma$, $i = 1, \dots, s$, mit einer Konstanten γ , weiter eingeschränkt. Diese als einfach diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren (**SDIRK**) bezeichneten Integratoren erweisen sich besonders vorteilhaft im Rahmen eines modifizierten Newton-Raphson-Verfahrens, siehe hierzu [Quint, 2012] und die dort referierte Literatur. Außerdem erfüllen alle in dieser Arbeit erwähnten RK-Methoden die folgenden Stabilitätsanforderungen

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad \sum_{i=1}^s b_i = 1, \quad (5.119)$$

mit denen die Konsistenz des Zeitintegrators sowie die Anwendbarkeit auf nicht-autonome Differentialgleichungssysteme sichergestellt wird.³⁶ Die zugehörigen Butcher-Arrays der in dieser Monographie herangezogenen DIRK-Verfahren sind in Tab. D.2 im Abschnitt D.1 hinterlegt.

Neben reinen Differentialgleichungssystemen treten in vielen technischen Anwendungen Problemstellungen auf, die sowohl Differentialgleichungen als auch lineare oder

³⁶Die von den Zwischenstellen c_i , $i = 1, \dots, s$, einzuhaltende Bedingung (5.119)₁, die sogenannte Knotenbedingung, entspricht einer zusätzlichen Voraussetzung an das Verfahren, die jedoch in der breiten mathematischen Gemeinschaft, siehe z. B. [Dekker und Verwer, 1984; Hairer et al., 1993; Werner und Arndt, 1986], allgemein akzeptiert ist. Ein RK-Verfahren ist konsistent, wenn Gl. (5.119)₂ gilt. Darüber hinaus ist Gl. (5.119)₂ eine von insgesamt p Bedingungen zur Sicherstellung der Konsistenzordnung p des Verfahrens, siehe exemplarisch [Fritzen, 1997].

nichtlineare algebraische Gleichungen enthalten. Solche Gleichungsstrukturen werden als Differential-Algebraische Gleichungssysteme (DAE) oder Algebro-Differentialgleichungssysteme betitelt. Ausgehend von einem implizit formulierten DAE-Modellproblem³⁷

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathbf{0} \quad (5.120)$$

führt die Partitionierung der Zeitskala mit einem DIRK-Verfahren durch Überführung in ein singular gestörtes Anfangswertproblem (direkter Zugang)³⁸ auf das nichtlineare Gleichungssystem

$$\mathbf{F}\left(T_{ni}, \mathbf{y}_{ni}, \frac{\mathbf{y}_{ni} - \mathbf{y}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}}\right) = \mathbf{0} \quad (5.121)$$

oder äquivalent als Formulierung mit $\dot{\mathbf{y}}_{ni}$ (differentielle Form) auf

$$\mathbf{F}(T_{ni}, \mathbf{y}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{y}}_{ni}, \dot{\mathbf{y}}_{ni}) = \mathbf{0}. \quad (5.122)$$

Die bereits oben erwähnte steif-genaue Eigenschaft der DIRK-Integratoren gewährleistet die exakte Einhaltung der in \mathbf{F} enthaltenen algebraischen Nebenbedingungen. Somit sind diese Verfahren ohne jegliche algorithmische Anpassungen sowohl auf ODE- als auch DAE-Systeme anwendbar. Die nachfolgenden zwei Abschnitte 5.2.2 und 5.2.3 demonstrieren die Applikation der Verfahrensvorschrift für DIRK-Verfahren auf die thermomechanisch gekoppelten Strukturgleichungen aus Tab. 5.1 und 5.2.

5.2.2 Applikation der Verfahrensvorschrift für DIRK-Verfahren auf dynamische Prozesse

Obwohl in der vorliegenden Arbeit auch die semidiskreten, dynamischen Systeme aus den Tabellen 5.3 und 5.5 von Interesse sind, beschränkt sich die Darstellung der Zeitdiskretisierung mittels DIRK-Verfahren in diesem Abschnitt ausschließlich auf die semidiskreten,

³⁷Beispielsweise liefert die Reduktion des semidiskreten, thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems aus Tab. 5.1 auf den quasistatischen, temperaturunabhängigen Spezialfall ein semiexplizites System von nichtlinearen Algebro-Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) \\ \dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) \end{array} \right\} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{y}(t) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}(t) \\ \mathbf{q}(t) \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^m, \quad \mathbf{y}(t_0) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}(t_0) \\ \mathbf{q}(t_0) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_0 \\ \mathbf{q}_0 \end{array} \right\},$$

mit $m = n_{uu} + n_Q$, siehe hierzu exemplarisch [Ellsiepen und Hartmann, 2001; Hartmann, 2002; Hartmann, 2003; Hartmann, 2005; Hartmann und Wensch, 2007; Hartmann et al., 2008a; Hartmann und Bier, 2008; Hartmann et al., 2009a; Hartmann und Hamkar, 2010]. Hierbei repräsentiert die diskrete Form der Gleichgewichtsbedingung $\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) = \mathbf{0}$ den algebraischen Nebenbedingungsanteil. Die konsistenten Anfangsbedingungen \mathbf{u}_0 und \mathbf{q}_0 erfüllen bereits a priori zum Zeitpunkt $t = t_0$ die algebraische Zwangsbedingung $\mathbf{g}_u(\mathbf{u}_0, \mathbf{q}_0, t_0) = \mathbf{0}$. Alternativ kann Gl. (5.120) auch ein reines implizites gewöhnliches Differentialgleichungssystem erster Ordnung abbilden.

³⁸Prinzipiell bieten sich für die Zeitdiskretisierung eines DAE-System zwei Vorgehensweisen an, die als direkter und indirekter Zugang bezeichnet werden, siehe [Wensch, 2003; Strehmel et al., 2012]. Die indirekte Vorgehensweise basiert auf einer Überführung des DAE-Systems unter Ausnutzung des Satzes über implizite Funktionen in ein zugeordnetes Differentialgleichungssystem. Der direkte Zugang regularisiert das DAE-System, indem es in ein singular gestörtes Anfangswertproblem transformiert wird. Nach Anwendung der Diskretisierungsvorschrift mit anschließender Grenzwertbildung resultiert das nichtlineare Gleichungssystem. Beide Varianten müssen nicht notwendigerweise zum selben Resultat führen.

thermomechanisch gekoppelten Strukturgleichungen aus Tab. 5.1. Alle hiervon abgeleiteten Beziehungen sind ohne Vorbehalt auch auf die zuerst genannten dynamischen Systeme übertragbar.

Zur Anwendung der Runge-Kutta Verfahrensklasse auf das in Tab. 5.1 angegebene gekoppelte Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung muss dieses zunächst durch Ausnutzen der Trivialbeziehung $\dot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{v}(t)$ in ein ODE-System erster Ordnung

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\dot{\mathbf{v}}(t) &= -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t) - \bar{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t), \\ \dot{\mathbf{u}}(t) &= \mathbf{v}(t), \\ \mathbf{C}_p(\mathbf{u}, \Theta, t)\dot{\Theta}(t) &= \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t), \\ \dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t), \end{aligned} \quad (5.123)$$

mit den Knotengeschwindigkeiten $\mathbf{v}(t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, überführt werden. Die Anpassung der allgemeinen Berechnungsvorschriften (5.112) und (5.118) liefert

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{ni} &= \mathbf{u}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{V}_{nj}, & \mathbf{V}_{ni} &= \mathbf{v}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{A}_{nj}, \\ \Theta_{ni} &= \Theta_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \dot{\Theta}_{nj}, & \mathbf{Q}_{ni} &= \mathbf{q}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^s a_{ij} \dot{\mathbf{Q}}_{nj}, \end{aligned} \quad (5.124)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{V}_{ni}, & \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{A}_{ni}, \\ \Theta_{n+1} &= \Theta_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\Theta}_{ni}, & \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Q}}_{ni}. \end{aligned} \quad (5.125)$$

Im nächsten Schritt soll \mathbf{V}_{ni} in den Gleichungen (5.124)₁ und (5.125)₁ unter Berücksichtigung der Beziehung (5.124)₂ eliminiert werden. Unter Einbeziehung der postulierten Stabilitätsanforderungen (5.119) resultieren

$$\mathbf{U}_{ni} = \mathbf{u}_n + c_i \Delta t_n \mathbf{v}_n + \Delta t_n^2 \sum_{j=1}^s \bar{a}_{ij} \mathbf{A}_{nj} \quad (5.126)$$

und

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \mathbf{v}_n + \Delta t_n^2 \sum_{i=1}^s \bar{b}_i \mathbf{A}_{ni}, \quad (5.127)$$

mit den neu definierten Wichtungsfaktoren

$$\bar{a}_{ij} = \sum_{k=1}^s \bar{a}_{ik} \bar{a}_{kj} \Leftrightarrow \bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} \mathbf{A} \quad \text{und} \quad \bar{b}_i = \sum_{j=1}^s \bar{b}_j \bar{a}_{ji} \Leftrightarrow \bar{\mathbf{b}}^T = \mathbf{b}^T \mathbf{A}. \quad (5.128)$$

Die dargelegte Vorgehensweise entspricht der Konstruktion eines sogenannten indirekten Runge-Kutta-Nyström Verfahrens (RKN) durch konsistente Anwendung einer

$\begin{array}{c c c} \mathbf{c} & \bar{\mathbf{A}} & \mathbf{A} \\ \hline & \bar{\mathbf{b}}^T & \mathbf{b}^T \end{array}$	$\begin{array}{c c} \mathbf{c} & \bar{\mathbf{A}} \\ \hline & \bar{\mathbf{b}}^T \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array}$	$\begin{array}{c cc} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} - \beta & \beta \\ \hline & \frac{1}{2} - \beta & \beta \\ \hline & 1 - \gamma & \gamma \end{array}$
(a) Indirektes RKN-Verfahren	(b) Nyström Verfahren	(c) Newmark-Familie eingebettet als Nyström Verfahren

Abbildung 5.5: Butcher-Tableaus für direkte und indirekte Runge-Kutta-Nyström Verfahren

zugrunde liegenden Runge-Kutta Methode, siehe exemplarisch [Hairer et al., 1993; Fritzen, 1997; Strehmel et al., 2012]. Ein schematisches Butcher-Tableau für solch ein indirektes RKN-Verfahren zeigt Abb. 5.5a. Neben der Interpretation der RKN-Methoden als RK-Verfahren existieren jedoch auch sogenannte direkte Runge-Kutta-Nyström Verfahren bzw. Nyström Methoden, für welche die Beziehungen in Gl. (5.128) nicht zutreffen, sodass keine Verknüpfung zwischen \bar{a}_{ij} , \bar{b}_i und a_{ij} , b_i besteht. Dennoch sind diese Einzschrittverfahren ohne algorithmische Modifikationen durch konsequente Anwendung der Gleichungen (5.126), (5.124)₂ - (5.124)₄, (5.127) und (5.125)₂ - (5.125)₄ auf ODE-Systeme erster und zweiter Ordnung applizierbar. Aus der geschichtlichen Entwicklung heraus wurden Nyström Methoden für rein mechanische Problemstellungen der Strukturdynamik mit elastischen Materialverhalten entwickelt, siehe Tab. D.3. In diesem Fall hängt die rechte Seite der semidiskreten Bewegungsgleichung, also der Term $\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, t)$, nicht von der Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{u}}(t)$ oder den inneren Variablen $\mathbf{q}(t)$ ab, sodass die Koeffizienten a_{ij} zur Generierung von \mathbf{V}_{ni} und \mathbf{Q}_{ni} , siehe Gl. (5.124)₂ und (5.124)₄, nicht länger benötigt werden. Auch solche Verfahren, für welche keine Wichtungsmatrix \mathbf{A} angegeben werden kann, tragen im Folgenden die Bezeichnung Nyström Verfahren und können in Form des kompakten Butcher-Arrays 5.5b spezifiziert werden. Fritzen [1997] demonstriert, dass die populäre Newmark-Familie (Newmark- β Methoden), siehe Abschnitt D.3, natürlicherweise in der Verfahrensklasse der direkten diagonal-impliziten Runge-Kutta-Nyström Integratoren (DIRKN) eingebettet ist. Abb. 5.5c zeigt das zugehörige Butcher-Tableau mit den algorithmischen Parametern $\beta \in [0, 1/2]$ und $\gamma \in [0, 1]$, welche maßgeblich die Stabilität und Genauigkeit des Verfahren beeinflussen. Hinsichtlich der Behandlung des semidiskreten, thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems aus Tab. 5.1 sind die Koeffizienten a_{ij} jedoch unverzichtbar. Daher wird in der vorliegenden Monographie solchen Nyström Methoden mit fehlender Wichtungsmatrix \mathbf{A} sowie der allgemeinen Newmark-Familie nur eine untergeordnete Bedeutung beigemessen. Einzige Ausnahme bildet die Trapezregel (Trapez/CAA), welche im Bereich der Strukturdynamik häufig als konstante Beschleunigungsmethode Erwähnung findet.³⁹ Wie Hughes [2000] aus Sicht der RK-Verfahren darstellt, ist die Trapezregel, mit dem zugehörigen Butcher-Tableau (D.2), identisch mit der in Abschnitt D.3 angegebenen Verfahrensvorschrift der Newmark-Familie

³⁹In der englischsprachigen Literatur wird häufig die Bezeichnung „constant average acceleration method“ verwendet, woraus sich das Akronym CAA ableitet.

für die effektive Parameterwahl $\beta = 1/4$ und $\gamma = 1/2$. Die Trapezregel (Trapez/CAA) repräsentiert damit den einzigen Vertreter, der in sämtlichen Integratorklassen, d. h. der DIRK-, DIRKN- und Newmark-Verfahrensklasse sowie in dem Schema der in Abschnitt 5.2.4 vorgestellten Generalized- α Methode enthalten ist. Für weitere Details zur Trapezregel sei exemplarisch auf [Ortiz und Popov, 1985] verwiesen.

Die bisher angegebenen Berechnungsvorschriften (5.124) bis (5.127) sind auf alle RK-Methoden anwendbar. Der Einsatz eines DIRK-Verfahrens reduziert die Gleichungen (5.124)₂ - (5.124)₄ und (5.126) auf die spezielle Form

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{ni} &= \mathbf{U}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \mathbf{V}_{ni} = \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S + \Delta t_n^2 \bar{a}_{ii} \mathbf{A}_{ni}, & \mathbf{V}_{ni} &= \mathbf{V}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \mathbf{A}_{ni}, \\ \Theta_{ni} &= \Theta_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \dot{\Theta}_{ni}, & \mathbf{Q}_{ni} &= \mathbf{Q}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{Q}}_{ni}, \end{aligned} \quad (5.129)$$

mit den aus vorhergehenden Stufenberechnungen bekannten Startwerten

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{ni}^S &= \mathbf{u}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}, & \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S &= \mathbf{u}_n + c_i \Delta t_n \mathbf{v}_n + \Delta t_n^2 \sum_{j=1}^{i-1} \bar{a}_{ij} \mathbf{A}_{nj}, \\ \mathbf{V}_{ni}^S &= \mathbf{v}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{A}_{nj}, & \Theta_{ni}^S &= \Theta_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\Theta}_{nj}, & \mathbf{Q}_{ni}^S &= \mathbf{q}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Q}}_{nj}. \end{aligned} \quad (5.130)$$

Für die Aufstellung des nichtlinearen Gleichungssystems kann z. B. einerseits die Wahl auf die Stufenwerte \mathbf{U}_{ni} , Θ_{ni} , \mathbf{Q}_{ni} oder Stufenableitungen \mathbf{A}_{ni} , $\dot{\Theta}_{ni}$, $\dot{\mathbf{Q}}_{ni}$, fallen. Im Hinblick auf die zuerst genannte Alternative, welche nach den Steigungswerten

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{ni} &= \frac{\mathbf{U}_{ni} - \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S}{\Delta t_n^2 \bar{a}_{ii}}, & \dot{\Theta}_{ni} &= \frac{\Theta_{ni} - \Theta_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}}, & \dot{\mathbf{Q}}_{ni} &= \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{Q}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}}, \\ \mathbf{V}_{ni} &= \mathbf{V}_{ni}^S + \Delta t_n a_{ii} \mathbf{A}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}) = \mathbf{V}_{ni}^S + \frac{a_{ii}}{\Delta t_n \bar{a}_{ii}} (\mathbf{U}_{ni} - \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S) = \frac{\mathbf{U}_{ni} - \mathbf{U}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} \end{aligned} \quad (5.131)$$

in Abhängigkeit der unbekannten Primärvariablen verlangt, folgt aus der Adaption der Verfahrensvorschrift (5.121) das nichtlineare Gleichungssystem der Dimension $n_{uu} + n_{\Theta u} + n_Q$ in jeder Stufe i zum Zeitpunkt T_{ni} , $i = 1, \dots, s$:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{M} \frac{\mathbf{U}_{ni} - \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S}{\Delta t_n^2 \bar{a}_{ii}} + \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) + \overline{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(T_{ni}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{C}_p(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, T_{ni}) \frac{\Theta_{ni} - \Theta_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} \\ &\quad - \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{V}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}), \Theta_{ni}, \dot{\Theta}_{ni}(\Theta_{ni}), \mathbf{Q}_{ni}, \dot{\mathbf{Q}}_{ni}(\mathbf{Q}_{ni}), T_{ni}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{Q}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r}_Q(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.132)$$

Die Lösung des nichtlinearen algebraischen Gleichungssystems (5.132) wird mittels der in Abschnitt 5.3 beschriebenen iterativen Berechnungsstrategie generiert. In den Argumentenlisten von $\mathbf{G}_u \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, $\mathbf{G}_\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ und $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ ist der Stufenzeitpunkt T_{ni}

nicht mehr explizit aufgeführt, da T_{ni} in Gl. (5.132) eine konstante Größe darstellt. Um Gl. (5.132)₁ kompakter zu schreiben, werden die dort enthaltenen zeitdiskretisierten Trägheitsterme gemäß Gl. (5.63) als

$$\mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{U}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{M} \frac{\mathbf{U}_{ni} - \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S}{\Delta t_n^2 \bar{a}_{ii}} + \bar{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(T_{ni}) \quad (5.133)$$

zusammengefasst.

Anmerkung 2 In Anlehnung an die Lösungsmethodik der Methode der finiten Elemente, siehe auch Abschnitt 5.3, assoziieren die Gleichungssätze $\mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\mathbf{G}_\Theta(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ in dem System (5.132) sämtliche global durchgeführten Berechnungen.⁴⁰ Die gewählten Bezeichnungen für \mathbf{G}_u und \mathbf{G}_Θ tragen diesem Sachverhalt Rechnung. In Kontrast hierzu werden die auf Gauß-Punkt- bzw. Quadraturebene entkoppelten inneren Variablen sowie der zeitdiskretisierte Gleichungssatz $\mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \in \mathbb{R}^{n_q}$, welcher sämtliche diskretisierte Evolutionsgleichungen des Konstitutivmodells enthält, nur formal in globale Spaltenvektoren zusammengefasst. Wie noch in Abschnitt 5.3 gezeigt wird, kann die Eigenschaft der Lokalität für $\mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \in \mathbb{R}^{n_q}$ in Bezug auf die inneren Variablen,⁴¹ wovon sich diese Bezeichnung ableitet, effizient bei der Selektion bzw. Verfolgung einer iterativen Lösungsprozedur ausgenutzt werden.

Es sei zusätzlich darauf hingewiesen, dass der in der vorliegenden Arbeit illustrierte ODE-DAE/DIRK-Ansatz nicht mit einem in [Eidel und Kuhn, 2011; Eidel et al., 2013] vorgestellten partitionierten Ansatz, der ebenfalls zur Zeitdiskretisierung RK- oder DIRK-Verfahren höherer Ordnung heranzieht, vergleichbar ist. Während das hier dargestellte Lösungsschema aus der Anwendung der vertikalen Linienmethode resultiert und die in der Zeit diskretisierten Gleichungen (5.132) simultan in jeder Stufe löst, wertet das in den angeführten Aufsätzen, auf Probleme der quasistatischen Festkörpermechanik beschränkte, letztere Konzept die auf Quadraturebene entkoppelten diskretisierten Evolutionsgleichungen unter Berücksichtigung einer konsistenten Verzerrungsinterpolation aus.⁴² Die diskreten globalen quasistatischen Gleichgewichtsbedingungen werden anschließend nur am Intervallende t_{n+1} nach den Primärvariablen, d. h. den Verschiebungen, iterativ gelöst.

Die zum Abschließen der Stufenberechnungen notwendigen Steigungswerte \mathbf{A}_{ni} , $\dot{\Theta}_{ni}$, $\dot{\mathbf{Q}}_{ni}$, $i = 1, \dots, s$, werden durch Einsetzen der ausgerechneten Stufenwerte in Gl. (5.131) ausgewertet, gespeichert und anschließend, falls erforderlich, gemäß den Gl. (5.125)₂ - (5.125)₄ und (5.127) zur Bestimmung der Näherungslösungen \mathbf{u}_{n+1} , \mathbf{v}_{n+1} , Θ_{n+1} , \mathbf{q}_{n+1} zum nächsten Zeitpunkt t_{n+1} verwendet. Wie bereits in Abschnitt 5.2.1 angesprochen,

⁴⁰In $\mathbf{G}_u \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\mathbf{G}_\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ sind Gleichungen zusammengefasst, die erst nach dem Assemblieren aller Elementbeiträge gelöst werden können.

⁴¹Zwar sind die auf Quadraturebene definierten zeitdiskretisierten Entwicklungsgleichungen nur von den an diesem Gauß-Punkt präsenten inneren Variablen abhängig, jedoch existieren durch die Knotenvariablen \mathbf{U}_{ni} und Θ_{ni} oder zumindest durch deren entsprechenden Elementfreiheitsgrade auch globale Abhängigkeiten.

⁴²Zur Vermeidung von Ordnungsreduktionen der angewendeten RK-Zeitdiskretisierungsverfahren muss die Verzerrungsinterpolation eine ausreichende Approximationsordnung q , $q \geq p$, aufweisen.

entfällt im Fall von steif-genauen DIRK-Verfahren der letzte Berechnungsschritt. Die steifgenaue Eigenschaft, welche $a_{sj} = b_j$ als auch $\bar{a}_{sj} = \bar{b}_j$ impliziert, garantiert $\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_{ns}$, $\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_{ns}$, $\Theta_{n+1} = \Theta_{ns}$, $\mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{q}_{ns}$, d. h. der letzte Berechnungsschritt (5.125) wird eingespart.

Im Rahmen der in Abschnitt 5.3 vorgestellten iterativen Lösungsprozedur zur Behandlung nichtlinearer Gleichungssysteme ist es zweckmäßig, die Gleichungsanteile $\mathbf{G}_u \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\mathbf{G}_\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ in $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$, $n_{xu} = n_{uu} + n_{\Theta u}$, sowie die primären Knotenvariablen $\mathbf{u}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\Theta_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ in $\mathbf{W}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$ zusammenzufassen:

$$\mathbf{G}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{G}_u(\mathbf{u}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{u}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \end{array} \right\}, \quad \mathbf{W}_{ni}(t) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_{ni}(t) \\ \Theta_{ni}(t) \end{array} \right\} \quad (5.134)$$

Durch die in Anlehnung an Quint [2012] eingeführte Kurznotation (5.134) erhält Gl. (5.132) die kompakte Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.135)$$

5.2.3 Applikation der Verfahrensvorschrift für DIRK-Verfahren auf quasistatische Prozesse

Prinzipiell bieten sich für die Zeitdiskretisierung eines DAE-System nach Wensch [2003] und Strehmel et al. [2012] zwei Vorgehensweisen an, die als direkter und indirekter Zugang bezeichnet werden. Ausschließlich bezugnehmend auf die erste Variante wird das quasistatische, thermomechanisch gekoppelte DAE-System aus Tab. 5.2 durch Überführen in ein singular gestörtes Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned} \varepsilon \dot{\mathbf{u}}(t) &= \mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t), \\ \mathbf{C}_p(\mathbf{u}, \Theta, t) \dot{\Theta}(t) &= \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t), \\ \dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \Theta, \mathbf{q}, t), \end{aligned} \quad (5.136)$$

mit dem Parameter $0 < \varepsilon \ll 1$, regularisiert. Die Applikation der in Abschnitt 5.2.1 vorgestellten, allgemeinen Verfahrensvorschrift auf Gl. (5.136) führt dann auf

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\mathbf{u}_{ni} - \mathbf{u}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{g}_u(\mathbf{u}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{C}_p(\mathbf{u}_{ni}, \Theta_{ni}, T_{ni}) \frac{\Theta_{ni} - \Theta_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} & \\ - \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{u}_{ni}, \mathbf{v}_{ni}(\mathbf{u}_{ni}), \Theta_{ni}, \dot{\Theta}_{ni}(\Theta_{ni}), \mathbf{Q}_{ni}, \dot{\mathbf{Q}}_{ni}(\mathbf{Q}_{ni}), T_{ni}) &= \mathbf{0}, \\ \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{Q}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.137)$$

Nach Bildung des Grenzwertes $\varepsilon \rightarrow 0$ folgt das nichtlineare algebraische Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{C}_p(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, T_{ni}) \frac{\Theta_{ni} - \Theta_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} \\ &\quad - \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{V}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}), \Theta_{ni}, \dot{\Theta}_{ni}(\Theta_{ni}), \mathbf{Q}_{ni}, \dot{\mathbf{Q}}_{ni}(\mathbf{Q}_{ni}), T_{ni}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{Q}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r}_Q(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.138)$$

Die Stufenableitungen für die Verschiebungen (Geschwindigkeiten) \mathbf{V}_{ni} , Temperaturen $\dot{\Theta}_{ni}$ und inneren Variablen $\dot{\mathbf{Q}}_{ni}$ sind durch die Ausdrücke

$$\mathbf{V}_{ni} = \frac{\mathbf{U}_{ni} - \mathbf{U}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}}, \quad \dot{\Theta}_{ni} = \frac{\Theta_{ni} - \Theta_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}}, \quad \dot{\mathbf{Q}}_{ni} = \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{Q}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}}$$

determiniert. Darüber hinaus sind die zugehörigen, aus vorhergehenden Stufenberechnungen bekannten Startwerte gemäß Gl. (5.114) durch

$$\mathbf{U}_{ni}^S = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{V}_{nj}, \quad \Theta_{ni}^S = \Theta_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\Theta}_{nj}, \quad \mathbf{Q}_{ni}^S = \mathbf{q}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Q}}_{nj}$$

festgelegt. Unter Verwendung einer in Analogie zu Abschnitt 5.2.2 gewählten Kurznotation ergibt sich die kompakte Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) = \begin{Bmatrix} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{U}_{ni}, \Theta_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{W}_{ni} = \begin{Bmatrix} \mathbf{U}_{ni} \\ \Theta_{ni} \end{Bmatrix}. \quad (5.139)$$

Für weitere Details zur Zeitdiskretisierung von quasistatischen Mehrfeldproblemen mittels diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren sei auf die Arbeiten von Hartmann et al. [2009b], Quint [2012], Hartmann et al. [2013], Netz [2013], Al-Kinani [2014], Rothe et al. [2015b], Rothe et al. [2015a], Rothe [2015] und Netz und Hartmann [2015] referiert.

Die Zeitdiskretisierung für das in Tab. 5.4 angegebene mechanische, semidiskrete DAE-System, dessen Beschleunigungsterme als vernachlässigbar postuliert werden, erfolgt vollkommen analog. Extensive Betrachtungen und Analysen des DAE/DIRK-Ansatzes mit Bezug zu inelastischen Systemen können den Aufsätzen von Hartmann [1999], Hartmann [2001a], Ellsiepen und Hartmann [2001], Hartmann [2000], Hartmann [2002], Hartmann [2003], Hartmann [2005], Hartmann [2006b], Hartmann und Bier [2007], Quint und Hartmann [2007], Quint et al. [2008], Hartmann et al. [2008a], Hartmann und Bier [2008], Hartmann et al. [2008b], Hartmann et al. [2009a], Rothe et al. [2011], Rothe et al. [2012], Krämer et al. [2013], Sguazzo et al. [2014] und Grafenhorst et al. [2014] entnommen werden.

5.2.4 Verfahrensvorschrift Generalized- α Methode

Der erste Teil dieses Abschnitts behandelt die von Chung und Hulbert [1993] als implizites Einschrittverfahren formulierte Generalized- α Methode (Gen- α) für ODE-Systeme

zweiter Ordnung. Umfangreiche Analysen zu dieser Variante der Generalized- α Methode, welche eine Verallgemeinerung der klassischen Newmark-Familie, siehe Anhang D.3, entspricht, können z. B. [Erlicher et al., 2002; Rang, 2013a; Rang, 2013b] entnommen werden. Konkrete Anwendungen dieser numerischen Methode zeigen exemplarisch [Bauchau et al., 1995; Kuhl, 1996] auf.

Die in diesem Abschnitt gewählte Notation zur Darstellung der Verfahrensvorschrift lehnt sich an die Arbeiten von Jansen et al. [2000], Rang [2013a] und Rang [2013b] an. Im Folgenden wird die für ODE-Systeme zweiter Ordnung entwickelte Einschrittversion der Generalized- α Methode auf die semidiskrete Bewegungsgleichung (5.75) angewendet. Hierzu muss an einem generalisierten Mittelpunkt des betrachteten Zeitintervalls $[t_n, t_{n+1}]$ ein modifiziertes dynamisches Gleichgewicht

$$M\ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m} = -\mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \boldsymbol{\Theta}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) - \bar{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(T_{n+\alpha_m}) \quad (5.140)$$

aufgestellt werden. Die zu den Zeitpunkten

$$T_{n+\alpha_f} = t_n + \alpha_f \Delta t_n = \alpha_f t_{n+1} + (1 - \alpha_f) t_n \quad (5.141)$$

und

$$T_{n+\alpha_m} = t_n + \alpha_m \Delta t_n = \alpha_m t_{n+1} + (1 - \alpha_m) t_n \quad (5.142)$$

zugeordneten Systemvektoren der Verschiebungen $\mathbf{U}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und Beschleunigungen $\ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ lassen sich als Linearkombinationen dieser Größen an den Zeitintervallgrenzen ausdrücken:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{n+\alpha_f} &= \alpha_f \mathbf{u}_{n+1} + (1 - \alpha_f) \mathbf{u}_n, & \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f} &= \alpha_f \mathbf{v}_{n+1} + (1 - \alpha_f) \mathbf{v}_n, \\ \ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m} &= \alpha_m \mathbf{a}_{n+1} + (1 - \alpha_m) \mathbf{a}_n \end{aligned} \quad (5.143)$$

Die Auswertung des Kraftresiduums $\mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \boldsymbol{\Theta}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ zum Zeitpunkt $T_{n+\alpha_f}$ in Gl. (5.140) geschieht mittels einer Mittelpunktsregel, sodass auch der in $\mathbf{g}_u = \mathbf{f}_{\text{int}} + \mathbf{f}_{\text{ext}}$ enthaltene externe Lastvektor⁴³ $\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ dieser Vorschrift unterzogen wird, d. h.

$$\mathbf{f}_{\text{ext}}|_{n+\alpha_f} = \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}). \quad (5.145)$$

Interpolationsregeln für $\boldsymbol{\Theta}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ und $\mathbf{Q}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ folgen weiter unten. Aus der Umstellung der bekannten Newmark-Approximationen (D.5) und (D.6) zur Beschreibung der diskreten Geschwindigkeiten \mathbf{v}_{n+1} und Beschleunigungen \mathbf{a}_{n+1} in Abhängigkeit der unbekannten Verschiebungen \mathbf{u}_{n+1} und den zu Beginn des Zeitschritts bekannten

⁴³Wie exemplarisch Erlicher et al. [2002] zeigen, können die externen Lasten alternativ auch durch eine verallgemeinerte Trapezregel interpoliert werden. Unter Berücksichtigung der Definitionen $\mathbf{f}_{\text{ext}}|_n := \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}_n, t_n)$ und $\mathbf{f}_{\text{ext}}|_{n+1} := \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}_{n+1}, t_{n+1})$ gilt:

$$\mathbf{f}_{\text{ext}}|_{n+\alpha_f} = \alpha_f \mathbf{f}_{\text{ext}}|_{n+1} + (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_{\text{ext}}|_n \quad (5.144)$$

Systemvektoren \mathbf{u}_n , \mathbf{v}_n , \mathbf{a}_n resultieren die Beziehungen

$$\mathbf{v}_{n+1} = \frac{\gamma}{\beta \Delta t_n} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) - \frac{\gamma - \beta}{\beta} \mathbf{v}_n - \frac{\gamma - 2\beta}{2\beta} \Delta t_n \mathbf{a}_n, \quad (5.146)$$

$$\mathbf{a}_{n+1} = \frac{1}{\beta \Delta t_n^2} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) - \frac{1}{\beta \Delta t_n} \mathbf{v}_n - \frac{1 - 2\beta}{2\beta} \mathbf{a}_n. \quad (5.147)$$

Folglich gelingt es durch Substitution der Gl. (5.146) und (5.147) in Gl. (5.143) die Größen $\dot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}$ und $\ddot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_m}$ als Funktion der Primärvariable \mathbf{u}_{n+1} abzubilden, d. h.

$$\dot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f} = \frac{\alpha_f \gamma}{\beta \Delta t_n} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) - \frac{\alpha_f \gamma - \beta}{\beta} \mathbf{v}_n - \frac{(\gamma - 2\beta) \alpha_f}{2\beta} \Delta t_n \mathbf{a}_n, \quad (5.148)$$

$$\ddot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_m} = \frac{\alpha_m}{\beta \Delta t_n^2} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) - \frac{\alpha_m}{\beta \Delta t_n} \mathbf{v}_n - \frac{\alpha_m - 2\beta}{2\beta} \mathbf{a}_n. \quad (5.149)$$

Der Einbau dieser Beziehungen in Gl. (5.140) führt schließlich auf den nichtlinearen algebraischen Gleichungssystemanteil

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_u(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) &= \mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_m} \\ &+ \mathbf{g}_u(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) + \bar{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(T_{n+\alpha_m}) = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.150)$$

Wie schon zuvor in Abschnitt 5.2.3 werden in die Argumentenliste von $\mathbf{G}_u \in \mathbb{R}^{n_u}$ nur die Lösungsvariablen aufgenommen. Eine explizite Auszeichnung der Zeitabhängigkeit entfällt. Eine kompaktere Darstellung für Gl. (5.150) ergibt sich unter Verwendung der folgenden Definition für die zeitdiskretisierten Trägheitskräfte:

$$\mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{u}_{n+1}, T_{n+\alpha_m}) = \mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_m} + \bar{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(T_{n+\alpha_m}) \quad (5.151)$$

Für eine spezielle Wahl des algorithmischen Parametersatzes $\{\alpha_f, \alpha_m, \beta, \gamma\}$ enthält die auf ODE-Systeme zweiter Ordnung angewendete Verfahrensklasse der Generalized- α Methoden klassische, weit verbreitete, Integratoren. Tab. 5.7 gibt hierzu einen Überblick.

Im Vergleich zu den Runge-Kutta Integratoren verfügt die Generalized- α Methode über die herausragende Eigenschaft einer kontrollierbaren numerischen bzw. algorithmischen Dämpfung.⁴⁴ Mit Hilfe eines harmonisierenden Parametersatzes $\{\alpha_f, \alpha_m, \beta, \gamma\}$ liegen die Bestrebungen auf einer optimalen Einstellung der numerischen Dissipation, sodass künstliche hochfrequente Schwingungsmoden abgeschwächt werden, während die Dämpfung in dem wichtigen niederfrequenten Bereich der Systemantwort auf ein Minimum reduziert wird. Unter Hinzunahme der Forderungen nach einer Konsistenzordnung⁴⁵ $p = 2$ und

⁴⁴Abgesehen von der Trapezregel sind die in der vorliegenden Arbeit betrachteten Runge-Kutta Integratoren aus Abschnitt 5.2.1 ebenfalls numerisch dissipativ, siehe Abschnitt 6.1.1. Aufgrund der fixierten algorithmischen Parametrisierung der Runge-Kutta Verfahren, welche in dem Butcher-Tableau des Verfahrens festgehalten wird, ist die numerische Dämpfung jedoch nicht modifizierbar.

⁴⁵Wie Rang [2013a] widerlegt, führt der in Gl. (5.152) angegebene Parametersatz nur für die Mehrschrittversion der Generalized- α Methode zur Genauigkeitsordnung $p = 2$. Die Konsistenzordnung des Einschrittverfahrens ist hinsichtlich theoretischer Überlegungen durch $p = 1$ limitiert. Die von zahlreichen Autoren durchgeführten Untersuchungen zeigen jedoch, dass aufgrund einer sehr kleinen Fehlerkonstanten die zu beobachtende numerische Konvergenzordnung $p = 2$ entspricht. Im Folgenden wird daher die Generalized- α Methode als ein Verfahren zweiter Ordnung interpretiert.

Tabelle 5.7: Verbreitete Derivate der Generalized- α Methoden mit zugehöriger algorithmischer Parametrisierung

Abk.	α_f	α_m	β	γ
N- β^a	1	1	$\frac{1}{4}(\gamma + \frac{1}{2})^2$	$\geq \frac{1}{2}$
HHT- α^b	$\alpha_{\text{HHT}} + 1$	1	$\frac{1}{4}(1 - \alpha_{\text{HHT}})^2$	$\frac{1}{2} - \alpha_{\text{HHT}}$
WBZ- α^c	1	$1 - \alpha_{\text{WBZ}}$	$\frac{1}{4}(1 - \alpha_{\text{WBZ}})^2$	$\frac{1}{2} - \alpha_{\text{WBZ}}$
Gen- α^d	$\frac{1}{1+\rho_\infty}$	$\frac{2-\rho_\infty}{1+\rho_\infty}$	$\frac{3-\rho_\infty}{2(1+\rho_\infty)}$	$\frac{1}{(1+\rho_\infty)^2}$

^aNewmark- β Methoden [Newmark, 1959; Hughes, 2000] mit den Eigenschaften: unbedingte Stabilität, Maximierung der Hochfrequenzdissipation.

^bHilber-Hughes-TaylorVerfahren [Hilber et al., 1977] mit Parametrisierung in Abhängigkeit von $\alpha_{\text{HHT}} \in [-1/3, 0]$ und den Eigenschaften: unbedingte Stabilität, Konsistenzordnung $p = 2$.

^cWood-Bossak-ZienkiewiczVerfahren [Wood et al., 1980] mit Parametrisierung in Abhängigkeit von $\alpha_{\text{WBZ}} \in [-1, 0]$ und den Eigenschaften: unbedingte Stabilität, Konsistenzordnung $p = 2$.

^dGeneralized- α Methoden [Chung und Hulbert, 1993] mit Parametrisierung in Abhängigkeit von $\rho_\infty \in [0, 1]$, siehe auch Gl. (5.152), und den Eigenschaften: unbedingte Stabilität, Konsistenzordnung $p = 2$, Maximierung der Hochfrequenzdissipation.

unbedingter Stabilität kann eine sehr effiziente Schar von Integratoren, ausgedrückt durch die Bedingungen

$$\alpha_f = \frac{1}{1 + \rho_\infty}, \quad \alpha_m = \frac{2 - \rho_\infty}{1 + \rho_\infty}, \quad \gamma = \frac{1}{2} + \alpha_m - \alpha_f, \quad \beta = \frac{1}{4}(1 + \alpha_m - \alpha_f)^2 \quad (5.152)$$

in Abhängigkeit des sogenannten Spektralradius $\rho_\infty \in [0, 1]$ als einzigen freien Parameter, angegeben werden, siehe exemplarisch [Chung und Hulbert, 1993; Kuhl, 1996; Erlicher et al., 2002]. Der Spektralradius kontrolliert dabei die algorithmische Dämpfung im Hochfrequenzbereich, wobei $\rho_\infty = 1$ ein numerisch dissipationsfreies Verfahren und $\rho_\infty = 0$ völlige Annihilation kennzeichnet.

Der Vollständigkeit halber sei angemerkt, dass bezogen auf das rein elastodynamische System aus Tab. 5.5 die Auswertung der in $\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, t) = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, t) + \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t)$ enthaltenen inneren Kräfte $\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, t)$ einerseits durch Anwendung einer Mittelpunktsregel, d. h.

$$\mathbf{f}_{\text{int}}|_{n+\alpha_f} = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}), \quad (5.153)$$

oder in Gestalt der Trapezregel

$$\mathbf{f}_{\text{int}}|_{n+\alpha_f} = \alpha_f \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}_{n+1}, t_{n+1}) + (1 - \alpha_f) \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}_n, t_n) \quad (5.154)$$

erfolgen kann. Für den Fall linearer strukturdynamischer Problemstellungen stimmen beide Formulierungen überein. Wie zuvor in den Gl. (5.140) und (5.150) angedeutet, wird hinsichtlich der Behandlung des gekoppelten Feldproblems, siehe Tab. 5.1, und zur Vermeidung von Modifikationen in den Elementroutinen⁴⁶ die erste Alternative (5.153)

⁴⁶Mit der in diesem Abschnitt vorgestellten Verfahrensvorschrift für die Generalized- α Methode können dieselben Element- und Materialroutinen wie für die DIRK-Verfahren verwendet werden. Fällt die Wahl auf die zweite Alternative (5.154), sind erhebliche Anpassungen auf lokaler Ebene, u. a. in Bezug auf die konsistente Linearisierung, unvermeidbar.

präferiert. Im Rahmen der Betrachtung von sogenannten energie- und impulskonservierenden Integrationsverfahren, siehe [Simo und Tarnow, 1992; Simo et al., 1992; Kuhl und Crisfield, 1999; Kuhl und Ramm, 1999; Kuhl und Ramm, 2000; Gonzalez, 2000; Betsch und Steinmann, 2001; Groß und Betsch, 2011] und die dort zitierte Literatur, ergibt sich eine weitere Möglichkeit zur Auswertung von $\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, t)$. Für einen umfassenden Überblick zu diesem Themenkomplex sei auf [Kuhl und Crisfield, 1999; Kuhl und Ramm, 1999; Kuhl und Ramm, 2000] verwiesen, deren vorgeschlagene erweiterte Version der „Generalized Energy-Momentum Method“ neben der Generalized- α Methode [Chung und Hulbert, 1993] auch viele weitere Verfahren dieser Kategorie wie beispielsweise die Newmark-Verfahren [Newmark, 1959], die „Energy-Momentum Method“ [Simo und Tarnow, 1992; Simo und Tarnow, 1994] oder die algorithmische dissipative Variante von Armero und Petőcz [1996], Armero und Petőcz [1998] und Armero und Petőcz [1999] umfasst.

Gemäß der in [Grafenhorst et al., 2017] präsentierten Vorgehensweise findet für die Zeitdiskretisierung der Evolutionsgleichung (5.98) für $\Theta(t)$ und den Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen (5.59) die als implizites Einschrittverfahren formulierte Generalized- α Methode für ODE-Systeme erster Ordnung Anwendung, siehe auch [Jansen et al., 2000; Dettmer und Perić, 2003; Rang, 2013a; Rang, 2013b]. Im Sinne der verfolgten monolithischen Kopplungsstrategie wird ein identischer algorithmischer Parametersatz $\{\alpha_f, \alpha_m, \gamma\}$ entsprechend Gl. (5.152) gewählt, wobei vom Integrationsparameter β nicht länger Gebrauch gemacht wird. Als Nachteil dieser Vorgehensweise ist anzufügen, dass das Kriterium für eine optimale numerische Dissipation durch die Beziehungen (5.152)₁-Gl. (5.152)₃ nicht mehr eingehalten wird. Der aus Stabilitätsgründen oft gewählte Parametersatz, siehe [Jansen et al., 2000; Dettmer und Perić, 2003; Rang, 2013a], ist in Gl. (5.152)₂ für α_m verletzt. Dennoch zeichnet sich die resultierende Generalized- α Methode durch die Eigenschaften der unbedingten Stabilität und einer Genauigkeitsordnung $p = 2$ aus.⁴⁷

Unter Beschränkung zunächst auf die Herleitung der effektiven thermischen Strukturgleichung an einem generalisierten Mittelpunkt gilt

$$\dot{\Theta}_{n+\alpha_m} = \mathbf{C}_p^{-1}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) \mathbf{r}_{\Theta}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \dot{\Theta}_{n+\alpha_m}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{Q}}_{n+\alpha_m}, T), \quad (5.155)$$

mit der zum Zeitpunkt $T_{n+\alpha_f}$ sowie an $\mathbf{U}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_u}$ und $\Theta_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ ausgewerteten, invertierbaren Kapazitätsmatrix $\mathbf{C}_p(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f})$. Infolge der in $\mathbf{r}_{\Theta} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ zusammengefassten Terme symbolisiert T einen allgemein gehaltenen Zeitpunkt, der zum Aufstellen der bekannten thermischen Temperaturschwindigkeiten $\bar{\Theta}(T) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta p}}$ den Wert $T = T_{n+\alpha_m}$ und zur Auswertung der Kapazitätsmatrix $\mathbf{C}_p \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta p}}$ sowie der verbleibenden Summanden in Gl. (5.99) den Wert $T = T_{n+\alpha_f}$ annimmt. Die rechte Seite

⁴⁷Streng genommen gilt die Parametrisierung Gl. (5.152)₁-Gl. (5.152)₃ in Abhängigkeit des Spektralradius ρ_{∞} auch wieder nur für die zugehörige Mehrschrittversion der Generalized- α Methode.

der raum- und zeitdiskretisierten Wärmeleitungsgleichung ist damit definiert als

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \dot{\Theta}_{n+\alpha_m}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{Q}}_{n+\alpha_m}, T) = \\ - \bar{\mathbf{C}}_p(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) \dot{\Theta}(T_{n+\alpha_m}) - \mathbf{p}_\kappa(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) \\ + \mathbf{p}_{r_\Theta}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \dot{\Theta}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_m}, \dot{\mathbf{Q}}_{n+\alpha_m}, T_{n+\alpha_f}) \\ + \mathbf{p}_{\Theta_q}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}). \end{aligned} \quad (5.156)$$

In identischer Weise zu Gl. (5.143) lassen sich die thermischen Strukturvektoren $\Theta_{n+\alpha_f}$ und $\dot{\Theta}_{n+\alpha_m}$ als Linearkombinationen der Knotentemperaturen an den Zeitintervallgrenzen

$$\Theta_{n+\alpha_f} = \alpha_f \Theta_{n+1} + (1 - \alpha_f) \Theta_n \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}, \quad (5.157)$$

$$\dot{\Theta}_{n+\alpha_m} = \alpha_m \dot{\Theta}_{n+1} + (1 - \alpha_m) \dot{\Theta}_n \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}} \quad (5.158)$$

ausdrücken. Die diskreten Temperaturschwindigkeiten zum Zeitpunkt t_{n+1} resultieren als Teil der Verfahrensvorschrift aus der Beziehung

$$\dot{\Theta}_{n+1} = \frac{1}{\gamma \Delta t_n} (\Theta_{n+1} - \Theta_n) - \frac{1 - \gamma}{\gamma} \dot{\Theta}_n. \quad (5.159)$$

Zur Anwendung derselben Material- und Elementroutinen werden die zeitdiskretisierten Differentialgleichungssysteme erster Ordnung in eine DIRK-typische Struktur überführt. Aus der Umstellung von Gl. (5.157)₁ folgt der Ausdruck

$$\Theta_{n+1} = \frac{1}{\alpha_f} \Theta_{n+\alpha_f} - \frac{1 - \alpha_f}{\alpha_f} \Theta_n, \quad (5.160)$$

dessen Substitution in Gl. (5.158)

$$\dot{\Theta}_{n+\alpha_m} = \frac{1}{\Delta t_\alpha} (\Theta_{n+\alpha_f} - \Theta_{n+\alpha_f}^S), \quad (5.161)$$

mit der Abkürzung $\Delta t_\alpha = \alpha_f \gamma \Delta t_n / \alpha_m$ und dem aus bereits zum Zeitpunkt t_n bekannten Größen berechneten Startvektor

$$\Theta_{n+\alpha_f}^S = \Theta_n + \left(\alpha_f - \gamma \frac{\alpha_f}{\alpha_m} \right) \Delta t_n \dot{\Theta}_n = \Theta_n + \frac{\alpha_m - \gamma}{\gamma} \Delta t_\alpha \dot{\Theta}_n, \quad (5.162)$$

liefert. Damit lautet die effektive thermische Strukturgleichung:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) = \mathbf{C}_p(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}) \frac{\Theta_{n+\alpha_f} - \Theta_{n+\alpha_f}^S}{\Delta t_\alpha} \\ - \mathbf{r}_\Theta(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \dot{\Theta}_{n+\alpha_m}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{Q}}_{n+\alpha_m}, T) = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.163)$$

Vollkommen analoge Aussagen ergeben sich aus der Anwendung der Generalized- α Methode für ODE-Systeme erster Ordnung auf die Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen (5.59). Die zeitdiskretisierten Entwicklungsgleichungen werden durch die nichtlinearen algebraischen Gleichungen

$$\mathbf{L}(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) = \frac{\mathbf{Q}_{n+\alpha_f} - \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}^S}{\Delta t_\alpha} - \mathbf{r}_Q(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) = \mathbf{0} \quad (5.164)$$

wiedergegeben, mit der Interpolationsregel

$$\mathbf{Q}_{n+\alpha_f} = \alpha_f \mathbf{q}_{n+1} + (1 - \alpha_f) \mathbf{q}_n \Leftrightarrow \mathbf{q}_{n+1} = \frac{1}{\alpha_f} \mathbf{Q}_{n+\alpha_f} - \frac{1 - \alpha_f}{\alpha_f} \mathbf{q}_n, \quad (5.165)$$

dem bekannten Startvektor

$$\mathbf{Q}_{n+\alpha_f}^S = \mathbf{q}_n + \left(\alpha_f - \gamma \frac{\alpha_f}{\alpha_m} \right) \Delta t_n \dot{\mathbf{q}}_n = \mathbf{q}_n + \frac{\alpha_m - \gamma}{\gamma} \Delta t_\alpha \dot{\mathbf{q}}_n \quad (5.166)$$

und

$$\dot{\mathbf{Q}}_{n+\alpha_m} = \frac{1}{\Delta t_\alpha} (\mathbf{Q}_{n+\alpha_f} - \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}^S). \quad (5.167)$$

Kongruent zu Gl. (5.159) ist die Ableitung $\dot{\mathbf{q}}_{n+1}$ zum Zeitpunkt t_{n+1} definiert als

$$\dot{\mathbf{q}}_{n+1} = \frac{1}{\gamma \Delta t_n} (\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n) - \frac{1 - \gamma}{\gamma} \dot{\mathbf{q}}_n. \quad (5.168)$$

Zusammenfassend führt die beschriebene Diskretisierungsprozedur in der Zeit in jedem Zeitschritt $[t_n, t_{n+1}]$ auf die Lösung des gekoppelten nichtlinearen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_u(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.169)$$

bzw. unter Berücksichtigung der Gruppierungen

$$\mathbf{G}(\mathbf{W}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{G}_u(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) \\ \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{u}_{n+1}, \Theta_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}, \quad n_{xu} = n_{uu} + n_{\Theta u}, \quad (5.170)$$

und

$$\mathbf{W}_{n+1}(t) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_{n+1}(t) \\ \Theta_{n+1}(t) \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}, \quad \mathbf{Q}_{n+1} := \mathbf{q}_{n+1} \in \mathbb{R}^{n_Q}, \quad (5.171)$$

auf die kompakte Darstellung⁴⁸

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{W}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{W}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1}) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.172)$$

Unter Ausblendung der Temperaturabhängigkeit ist die erläuterte Zeitdiskretisierungsstrategie ohne Modifikationen auch auf das semidiskrete strukturdynamische ODE-System aus Tab. 5.3 applizierbar. Der Ausschluss inelastischen Werkstoffverhaltens, d. h. der Abwesenheit von inneren Variablen, führt auf die effektiven Strukturgleichungen der Elastodynamik, siehe hierzu auch [Kuhl, 1996; Kuhl und Ramm, 1999; Kuhl und Crisfield, 1999; Erlicher et al., 2002; Hartmann, 2007; Popp, 2012].

⁴⁸Mit der Absicht einer, bis auf den Zeitdiskretisierungsindex, mit den DIRK-Verfahren konformen Nomenklatur, siehe Gl. (5.139), auch für die zeitdiskretisierten Gleichungen der Generalized- α Methode zu generieren, wurde die Umdeklaration in Gl. (5.171) vollzogen.

5.2.5 Schrittweitenkontrolle

Eine zentrale Fragestellung, die sich bei der Zeitintegration von gewöhnlichen Differentialgleichungs- oder Algebro-Differentialgleichungssystemen stellt, ist die Wahl einer geeigneten Zeitschrittweite Δt_n . Kriterien wie Berechnungseffizienz und Genauigkeit der Lösung beeinflussen maßgeblich diese Entscheidung. Wie allgemein bekannt und in Kapitel 6 anhand zahlreicher numerischer Beispiele noch gezeigt wird, nimmt bei der Anwendung der Algorithmen aus den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.4 der globale Zeitdiskretisierungsfehler mit geringer werdender Schrittweite ab, d. h. die Genauigkeit der Lösung wird verbessert. In direktem Zielkonflikt hierzu steht der Berechnungsaufwand, der, um die Effizienz des Verfahrens zu steigern, nach möglichst großen Schrittweiten verlangt.

Bei der Behandlung von Prozessen mit unterschiedlichen Zeitskalen ist es ineffizient durchgehend eine konstante Zeitschrittweite zu verwenden. Vielmehr ist es wünschenswert das Zeitintervall derart zu variieren, dass innerhalb glatter Lösungsbereiche die Simulation mit Blick auf die Rechenzeit mit einer so groß wie möglichen Zeitschrittweite voranschreitet, während in den transienten Teilen der Lösung zur Einhaltung der gewünschten Genauigkeit eine Herabsetzung der Schrittlänge Δt_n stattfindet. Darüber hinaus kann im Fall von Stabilitätsproblemen oder sich stark ändernden Lösungsverhalten die Zeitdiskretisierung mit einer konstanten Zeitschrittweite nicht realisierbar sein.

Im Rahmen des geschilderten Szenarios ist es daher unerlässlich, zuverlässige, adaptive Strategien zur Steuerung der Zeitschrittweite heranzuziehen, die das Lösungsverhalten der zugrunde liegenden Gleichungen berücksichtigen und infolgedessen die globale Prozedur stabilisieren. Übliche Schrittweitensteuerungen orientieren sich dabei an einer Abschätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers δ .⁴⁹ Das Ziel ist es, die Schrittweite Δt_n so zu prognostizieren, dass der lokale Integrationsfehler δ nicht eine vom Nutzer vorgegebene Fehlerschranke überschreitet. Wie außerdem zahlreiche mathematische Untersuchungen belegen, wird an diese Verfahrensweise die Erwartung geknüpft, dass auch der globale Zeitdiskretisierungsfehler e beschränkt bleibt oder zumindest nicht zu sehr anwächst. Die folgenden Erläuterungen sollen eine kurze Einführung in die allgemeine Theorie klassischer Diskretisierungsverfahren geben.

Bezugnehmend auf das in Gl. (5.106) definierte Anfangswertproblem lässt sich im Allgemeinen jedes Einschrittverfahren in der Gestalt

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \Phi(t_n, \mathbf{y}_n, \Delta t_n) \quad (5.173)$$

angeben, wobei die Verfahrens- bzw. Inkrementfunktion $\Phi(t_n, \mathbf{y}_n, \Delta t_n)$ des Einschrittverfahrens nur formal explizit dargestellt ist und auch implizite Integratoren umfasst. Der lokale Diskretisierungsfehler des Einschrittverfahrens δ_{n+1} an der Stelle t_{n+1} ergibt sich aus der Differenz zwischen der exakten Lösung $\mathbf{y}(t_{n+1})$ und der numerischen Lösung \mathbf{y}_{n+1} , wobei letztere Größe jetzt aus einem Integrationsschritt mit dem fehlerunbehafteten Startvektor $\mathbf{y}(t_n)$, d. h.

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \Phi(t_n, \mathbf{y}(t_n), \Delta t_n), \quad (5.174)$$

⁴⁹In einigen wissenschaftlichen Aufsätzen, wie z. B. in [Hughes, 2000], wird der lokale Diskretisierungs- bzw. Integrationsfehler auch als lokaler Abschneidefehler bezeichnet.

resultiert:

$$\delta_{n+1} := \mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}(t_{n+1}) - (\mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \Phi(t_n, \mathbf{y}(t_n), \Delta t_n)) \quad (5.175)$$

Für eine qualitative Beurteilung des Einschrittverfahrens nimmt der lokale Abschneidefehler eine zentrale Rolle ein. So ist ein auf das Anfangswertproblem (5.106) angewendetes Einschrittverfahren konsistent, wenn

$$\lim_{\Delta t_n \rightarrow 0} \frac{\|\delta_{n+1}\|}{\Delta t_n} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{\Delta t_n \rightarrow 0} \frac{\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}(t_n)}{\Delta t_n} = \lim_{\Delta t_n \rightarrow 0} \Phi(t_n, \mathbf{y}(t_n), \Delta t_n), \quad (5.176)$$

$$\lim_{\Delta t_n \rightarrow 0} \Phi(t_n, \mathbf{y}(t_n), \Delta t_n) = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}(t_n))$$

für $t_0 \leq t_n < t_e$ gilt. Die Größenordnung des lokalen Integrationsfehlers, also die Güte der Approximation in Gestalt des relativen Abstands $\|\delta_{n+1}\| = \|\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1}\|$, wird durch den Begriff der Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$ beschrieben. Nach Strehmel et al. [2012, S. 25] zeichnet sich ein Einschrittverfahren durch die Konsistenzordnung p aus, wenn für genügend kleine Schrittweiten $0 < \Delta t_n \leq \Delta T_\delta$ sowie für hinreichend oft stetig partiell differenzierbare Funktionen $\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \in \mathbb{R}^m$ die Abschätzung

$$\|\delta_{n+1}\| \leq C_\delta \Delta t_n^{p+1} \quad \text{innerhalb} \quad t_0 \leq t_n < t_e, \quad (5.177)$$

mit einer von Δt_n unabhängigen Konstante C_δ , Gültigkeit besitzt. Die Konstante C_δ hängt von \mathbf{f} und den partiellen Ableitungen von \mathbf{f} bis zur Ordnung p , insbesondere von der Lipschitz-Konstante⁵⁰ L , ab.

Aufbauend auf dem Nachweis der lokal geprägten Konsistenz (5.176) und der Abschätzung (5.177) lassen sich globale Aussagen zur Konvergenz und Konvergenzordnung eines auf das Anfangswertproblem (5.106) angewendeten Einschrittverfahrens ableiten, welche sich auf den globalen Zeitdiskretisierungsfehler

$$\mathbf{e}_n := \mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}_n, \quad n = 0, \dots, N, \quad (5.178)$$

ausgedrückt als Differenz zwischen der exakten Lösung $\mathbf{y}(t_n)$ und der approximierten Lösung \mathbf{y}_n , beziehen. Ein Integrationsalgorithmus wird als konvergent bezeichnet, wenn dieser die Beziehung

$$\max_n \|\mathbf{e}_n\| \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad \Delta t_{\max} = \max(\Delta t_0, \dots, \Delta t_{N-1}) \rightarrow 0 \quad (5.179)$$

⁵⁰Die Lipschitz-Stetigkeit charakterisiert in der Analysis eine Verschärfung der Stetigkeit. Eine Funktion $\mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ genügt auf einem abgeschlossenen Gebiet $G := \{(t, \mathbf{y}) : |t - t_0| \leq R_t, \|\mathbf{y} - \mathbf{y}_0\| \leq R_y\}$, $R_t > 0$, $R_y > 0$, im zweiten Argument einer Lipschitz-Bedingung, wenn eine Konstante L existiert, sodass

$$\|\mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}) - \mathbf{f}(t_n, \mathbf{v})\| \leq L \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\| \quad \forall (t, \mathbf{u}), (t, \mathbf{v}) \in G$$

gilt. Der Nachweis der Lipschitz-Stetigkeit für $\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y})$ wird durch die Präzisierung der Lipschitz-Konstanten L gezeigt und gelingt mittels der Bestimmung der maximalen ersten partiellen Ableitungen von $\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y})$ (Jacobi-Matrix) auf G :

$$L = \max_{(t, \mathbf{w}) \in G} \|\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}|_{\mathbf{y}=\mathbf{w}}\|$$

Die Lipschitz-Stetigkeit ist ein wichtiges Werkzeug in der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen, um Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu beweisen. Für weitere theoretische Erläuterungen sei exemplarisch auf [Hairer et al., 1993; Deuffhard und Bornemann, 2008; Strehmel et al., 2012] referiert.

erfüllt, also im Rahmen exakter Arithmetik die analytische Lösung $\mathbf{y}(t_n)$ durch Verfeinerung des Zeitgitters beliebig genau approximiert. Wie Ascher und Petzold [1998, S. 39–41] und Strehmel et al. [2012, S. 28–29] in umfangreichen Konvergenzbeweisen unter Voraussetzung einer genügend glatten Funktion \mathbf{f} und Lipschitz-stetigen Inkrementfunktion des Einschrittverfahrens Φ , mit der Konsistenzordnung p , erörtern, kann der globale Diskretisierungsfehler durch

$$\max_n \|\mathbf{e}_n\| \leq C_e \Delta t_{\max}^p \quad \text{bzw. innerhalb } t_0 \leq t_n \leq t_e \quad \text{durch} \quad \|\mathbf{e}_n\| \leq \hat{C}_e \Delta t_{\max}^p, \quad (5.180)$$

mit $\Delta t_{\max} = \max(\Delta t_0, \dots, \Delta t_{N-1})$, $0 < \Delta t_{\max} \leq \Delta T_e$, abgeschätzt werden. Das Einschrittverfahren der Form (5.173) konvergiert dann mit der globalen Konvergenzordnung p . In die Berechnung der von den verwendeten Schrittweiten unabhängigen Konstanten C_e und \hat{C}_e gehen die Funktion \mathbf{f} selbst und deren partiellen Ableitungen bis zur Ordnung p ein. Präziser formuliert, es gehen in die Abschätzung des globalen Fehlers (5.180) Schranken der in Gl. (5.177) spezifizierten Form für den lokalen Fehler ein, siehe [Strehmel et al., 2012]. Es ist daher verständlich, dass die Kontrolle des lokalen Integrationsfehlers eine Beschränkung des globalen Zeitdiskretisierungsfehlers herbeiführt oder zumindest ein zu starkes Anwachsen des Letzteren verhindert. Diese Schlussweise, die Stabilität und Konsistenz von einem Einschrittverfahren einfordert, stellt ein leitendes Prinzip bei der theoretischen Durchdringung der numerischen Prozesse bei Differentialgleichungen dar und sorgt dafür, dass sämtliche in dieser Arbeit verwendeten Integratoren konvergent sind. Die Konvergenzordnung, siehe Gl (5.180), stimmt somit mit der Konsistenzordnung, siehe Gl. (5.177), überein, sodass im Folgenden auf eine mathematisch exakte Unterscheidung der beiden Begriffe weitgehend verzichtet wird.

Rundungsfehler infolge der endlich genauen Computerarithmetik limitieren die erreichbare Präzision, weshalb ab einer optimalen Schrittweite Δt_{opt} der globale Gesamtfehler⁵¹ nicht weiter sinkt, sondern sogar wieder ansteigt, siehe hierzu [Strehmel et al., 2012, S. 29–32]. Bis zu Δt_{opt} entspricht das Konvergenzverhalten des Gesamtfehlers im Wesentlichen dem des globalen Zeitdiskretisierungsfehlers, siehe Gl. (5.180). Demzufolge müssen bei der Durchführung der Zeitintegration zu kleine Schrittweiten, bei denen eine Akkumulation von Rundungsfehlern stattfindet, vermieden werden. Andererseits erfordert die Zerlegung des zu simulierenden Zeitintervalls in eine lange Schrittweitensequenz einen erhöhten Einsatz an Berechnungsressourcen. Ein Schwerpunkt dieser Monographie liegt daher auf dem Einsatz von Integrationsverfahren hoher Konvergenzordnung, die bereits bei verhältnismäßig großen Schrittweiten kleine globale Diskretisierungsfehler zur Folge haben. Eine intelligente Regelung der Schrittweite, um die es in den nachfolgenden Paragraphen geht, induziert eine weitere Effizienzsteigerung. Für zusätzliche theoretische Erläuterungen zu klassischen Diskretisierungsverfahren sei auf die Standardwerke von Hairer et al. [1993], Hairer und Wanner [1996] und Strehmel et al. [2012] verwiesen.

Prinzipiell können zur adaptiven Schrittweitensteuerung Konzepte auf Basis der physikalischen Eigenschaften des dynamischen Systems oder auf Basis von Fehlerschätzern unterschieden werden. Die Ansätze aus der zuerst genannten Gruppe koppeln im Bereich

⁵¹Die auf realen produktiven Computersystemen verwendete Gleitpunktarithmetik resultiert in einem Rundungsfehler. Der im Rahmen der Zeitintegration akkumulierte Gesamtfehler setzt sich dann aus dem globalen Zeitdiskretisierungsfehler und dem Rundungsfehler zusammen.

der Strukturodynamik die automatische Zeitschrittanpassung an charakteristische Eigenfrequenzinformationen bzw. Schwingungsperioden, siehe hierzu exemplarisch [Bergan und Mollestad, 1985; Jacob und Ebecken, 1993]. Sehr viel häufiger sind allerdings Ansätze aus der zweiten Klasse anzutreffen, welche die Abschätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers zum Ziel haben. Für strukturdynamische Problemstellungen gehen die ersten Algorithmen auf Zienkiewicz et al. [1984] zurück. Zienkiewicz et al. [1984], Zienkiewicz und Xie [1991], Zeng et al. [1992], Wiberg et al. [1992], Li et al. [1993], Riccius und Schweizerhof [1996] und Riccius [1997] gewinnen in Verbindung mit Zeitintegrationsverfahren der Newmark-Familie eine a posteriori Abschätzung des lokalen Integrationsfehlers aus der Differenz zwischen der Näherungslösung \mathbf{y}_{n+1} und einer in einer Taylor-Entwicklung um t_n abgeleiteten, verbesserten Approximation. Weitere Erläuterungen zu dieser Technik in Bezug auf Derivate der Generalized- α Methode können auch [Hulbert und Jang, 1995; Kuhl, 1996; Kuhl und Ramm, 1999] entnommen werden. Alternativ stützen sich eine Vielzahl von lokalen Fehlerestimatoren auf einen Vergleich zwischen Näherungslösungen, berechnet mit Zeitintegrationsverfahren unterschiedlicher Genauigkeitsordnung, bzw. auf eine Gegenüberstellung von Integrationsschritten mit unterschiedlicher Approximationsgüte.

Eine in der Praxis bewährte und im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausschließlich angewendete Strategie zur automatischen Schrittweitenkontrolle sind sogenannte eingebettete Verfahren. Das Konzept der Einbettung nutzt auf elegante Art und Weise den Vergleich zweier Näherungslösungen aus, um den lokalen Diskretisierungsfehler abzuschätzen. Grundvoraussetzung ist eine Aufteilung des lokalen Verfahrensfehlers δ_{n+1} in

$$\delta_{n+1} = \Delta t_n^{p+1} \Psi(t_n, \mathbf{y}(t_n)) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{p+2}), \quad (5.181)$$

die aufgrund der sämtlichen in der vorliegenden Monographie verwendeten Einschrittverfahren, mit der Genauigkeitsordnung p , zugesprochenen Konsistenz, siehe Gl. (5.176) und (5.177), existiert und aus einer Taylor-Entwicklung um den Entwicklungspunkt t_n hervorgeht. Hierbei wird der lokale Fehler in den Hauptteil $\Delta t_n^{p+1} \Psi(t_n, \mathbf{y}(t_n))$ sowie in einen Term höherer Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t_n^{p+2})$ aufgeteilt, wobei für genügend kleine Zeitschrittweiten Δt_n der Fehler des Hauptteils dominiert. In den weiteren Ausführungen ist es daher ausreichend, lediglich den Hauptteil des lokalen Abschneidefehlers zur Steuerung der Schrittweite heranzuziehen. Unter Beteiligung eines zweiten Verfahrens mit der Konsistenzordnung $\hat{p} < p$, dessen Integrationsschritte für die Annahme $\hat{\mathbf{y}}_n = \mathbf{y}(t_n)$ analog zu Gl. (5.173) durch

$$\hat{\mathbf{y}}_{n+1} = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \hat{\Phi}(t_n, \mathbf{y}(t_n), \Delta t_n), \quad (5.182)$$

mit der Verfahrensfunktion $\hat{\Phi}$, erfasst werden können, gelingt es, eine Schätzung für den Hauptteil des lokalen Integrationsfehlers zu generieren. Für die in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden eingebetteten Integratoren gilt stets $\hat{p} = p - 1$. Zusammengefasst führen beide Zeitdiskretisierungsverfahren zu den lokalen Fehlern

$$\delta_{n+1} := \mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1} = \Delta t_n^{p+1} \Psi(t_n, \mathbf{y}(t_n)) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{p+2}), \quad (5.183)$$

$$\hat{\delta}_{n+1} := \hat{\mathbf{y}}(t_{n+1}) - \hat{\mathbf{y}}_{n+1} = \Delta t_n^{\hat{p}+1} \hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t_n)) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{\hat{p}+2}). \quad (5.184)$$

Durch Bildung der Differenz von Gl. (5.183) und Gl. (5.184) lässt sich schließlich der

Hauptteil des lokalen Integrationsfehlers des Verfahrens niedriger Ordnung abschätzen:

$$\begin{aligned}\delta_{n+1} - \hat{\delta}_{n+1} &= \mathbf{y}_{\text{err}} := \hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1} = \Delta t_n^{\hat{p}+1} \hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t_n)) + \mathcal{O}(\Delta t_n^{\hat{p}+2}) \\ &\approx \Delta t_n^{\hat{p}+1} \hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t_n))\end{aligned}\quad (5.185)$$

Das Ziel der hier vorgestellten adaptiven Schrittweitenkontrolle ist es, die Näherung für den lokalen Fehler unterhalb einer vorgegebenen Fehlerschranke zu halten, d. h.

$$\Delta t_n^{\hat{p}+1} \|\hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t_n))\| \approx \|\mathbf{y}_{\text{err}}\| \leq \varepsilon_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \varepsilon_a, \quad (5.186)$$

wobei die Toleranzgrenze auf der rechten Seite in Gl. (5.186) aus einem Konglomerat (Mischung) vom Nutzer definierter absoluter und relativer Fehlertoleranzen, ε_a und ε_r , resultiert. Nur wenn die Forderung (5.186) erfüllt ist, wird der Zeitschritt $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ akzeptiert und der Lösungsprozess mit einer neuen Schrittweite Δt_{new} weiter vorangetrieben, andernfalls muss der aktuelle Zeitschritt ausgehend von t_n mit einem kleinerem Zeitinkrement $\Delta t_{\text{new}} < \Delta t_n$ wiederholt werden. Unter der Annahme, dass der Operator $\hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t_n))$ näherungsweise konstant innerhalb des betrachteten Zeitschritts $[t_n, t_{n+1}]$ bleibt, d. h. $\|\hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t_n))\| = C_n$, $C_n = C = \text{const.}$, folgt das asymptotische Verhalten⁵²

$$\|\mathbf{y}_{\text{err}}\| = \|\hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}\| \approx C \Delta t_n^{\hat{p}+1}. \quad (5.187)$$

Die Vereinnahmung der Äquivalenz zwischen der Abschätzung des lokalen Integrationsfehlers für ein neues Zeitinkrement Δt_{new} , wobei zusätzlich die Modellannahme $C_{\text{new}} = C_n = C = \text{const.}$ eingeht,⁵³ und der gemischten Fehlerschranke aus Gl. (5.186) wird nun zur Vorhersage einer optimalen neuen Zeitschrittweite Δt_{new} herangezogen:

$$C \Delta t_{\text{new}}^{\hat{p}+1} = \varepsilon_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \varepsilon_a \quad (5.188)$$

Durch Elimination der unbekannten Konstanten C mit Hilfe der aus Gl. (5.187) resultierenden Umformung $C = \|\mathbf{y}_{\text{err}}\| / \Delta t_n^{\hat{p}+1}$ geht schließlich aus Gl. (5.188) eine explizite Abschätzungsformel für den neuen Zeitschritt

$$\Delta t_{\text{new}} = \Delta t_n e_y^{-1/(\hat{p}+1)}, \quad \text{mit} \quad e_y = \frac{\|\mathbf{y}_{\text{err}}\|}{\varepsilon_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \varepsilon_a}, \quad (5.189)$$

hervor.⁵⁴

⁵²Die Annahme für die theoretische asymptotische Fehlerabschätzung (5.187) ist nur für hinreichend kleine Zeitschritte Δt_n gültig. Zudem setzt Gl. (5.187) voraus, dass das Einschrittverfahren seine theoretische Konsistenzordnung erreicht. Ordnungs- bzw. Konvergenzreduktionen, siehe z. B. [Prothero und Robinson, 1974], führen ebenfalls zu einer Verletzung von Gl. (5.187).

⁵³Wie diverse Autoren, siehe exemplarisch [Gustafsson et al., 1988; Gustafsson, 1991; Gustafsson, 1992; Gustafsson, 1994; Hairer et al., 1993; Söderlind, 2002], erörtern, ist die Modellannahme einer langsamen Variation für $\|\hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t))\|$ nur selten gerechtfertigt. In diesem Fall stellt die Konstante C eine schlechte Approximation für C_n und C_{new} dar.

⁵⁴Neben einer absolut pro Zeitschritt definierten Fehlerschranke $\varepsilon_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \varepsilon_a$ und lokalem Fehlermaß $\|\mathbf{y}_{\text{err}}\|$ kommen in vielen Veröffentlichungen, siehe z. B. [Gustafsson et al., 1988; Gustafsson, 1991; Gustafsson, 1992], auch auf einen Einheitsschritt bezogene Größen, d. h. $\tilde{\varepsilon}_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \tilde{\varepsilon}_a$ und $\|\tilde{\mathbf{y}}_{\text{err}}\| = \|\mathbf{y}_{\text{err}}\| / \Delta t_n$, zum Einsatz. Die Fehlertoleranzen $\tilde{\varepsilon}_r$ und $\tilde{\varepsilon}_a$ symbolisieren ebenfalls auf einen Einheitsschritt bezogene Größen. Bei Verwendung solcher Toleranz- und Fehlermaße zur Berechnung von Δt_{new} muss der Exponent in Gl. (5.189)₁ angepasst werden. Es ergibt sich dann $\Delta t_{\text{new}} = \Delta t_n e_y^{-1/\hat{p}}$, mit $e_y = \|\tilde{\mathbf{y}}_{\text{err}}\| / (\tilde{\varepsilon}_r \|\hat{\mathbf{y}}_n\| + \tilde{\varepsilon}_a)$.

Dieser erste in einer Vielzahl von mathematischen Veröffentlichungen vorgeschlagene automatische Schrittweitenregler, siehe z. B. [Hairer et al., 1993; Lang, 2001; Strehmel et al., 2012], scheitert jedoch oftmals bei der korrekten Beschreibung der Beziehung zwischen Schrittweite und lokalem Integrationsfehler. So sind bei praktischen Berechnungen mit der adaptiven Vorhersagestrategie (5.189) sehr häufig starke Oszillationen in Δt_n während des Zeitintegrationsprozesses zu beobachten, die aus einem ständigen Wechsel von akzeptierten und verworfenen Zeitschritten herrühren. Ein Grund hierfür ist, dass der lokale Fehlerschätzer nach einer drastischen Schrittweiterreduktion sehr kleine Werte offeriert. Der basierend auf diesem Fehler vorgeschlagene neue Zeitschritt ist daher zu optimistisch und führt zu wiederholten Verwerfungen des Zeitinkrements. Dies mündet zumeist in einem relativ schroffen und ineffizienten Schrittweitenverhalten. Praktisch sind daher einige Modifikationen von Gl. (5.189) notwendig, die im Folgenden erörtert werden sollen.

Obwohl die oben angegebene Fehlerabschätzung (5.185) nur für den „zweitbesten“ Näherungswert $\hat{\mathbf{y}}_{n+1}$ erfolgt, ist es im Bereich der numerischen Mathematik üblich, die Lösung in der Zeit durch die Approximation höherer Ordnung, also \mathbf{y}_{n+1} , voranschreiten zu lassen. Dieses Konzept, welches streng genommen zu einer Verletzung der lokalen Genauigkeitskontrolle führt, wird als lokale Extrapolation bezeichnet. Weitere Einzelheiten hierzu sind [Hairer et al., 1993; Hairer und Wanner, 1996] zu entnehmen. Für eine theoretische Rechtfertigung dieser Inkonsistenz, basierend auf einer regelungstechnischen Analyse, sei auf [Deuffhard und Bornemann, 2008] referiert.

Aufgrund der verschiedenartigen physikalischen Eigenschaften der in dem inhomogenen Lösungsvektor $\mathbf{y}(t) = \{\mathbf{u}(t)^T, \mathbf{v}(t)^T, \Theta(t)^T, \mathbf{q}(t)^T\} \in \mathbb{R}^m$, $m = 2n_{\text{uu}} + n_{\Theta\text{u}} + n_{\text{Q}}$, zusammengefassten Teilvektoren $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, $\mathbf{v}(t) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, $\Theta(t) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta\text{u}}}$ und $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_{\text{Q}}}$, die sich durch unterschiedliche Größenordnungen auszeichnen, ist es nach Ehlers und Ellsiepen [1998], Diebels et al. [1999] und Ellsiepen und Hartmann [2001] zweckmäßig, die Näherung für den lokalen Integrationsfehler (5.185) in

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{u}}_{n+1} - \mathbf{u}_{n+1}, & \mathbf{v}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{v}}_{n+1} - \mathbf{v}_{n+1}, \\ \Theta_{\text{err}} &:= \hat{\Theta}_{n+1} - \Theta_{n+1}, & \mathbf{q}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{q}}_{n+1} - \mathbf{q}_{n+1} \end{aligned} \quad (5.190)$$

zu separieren. Deuffhard und Bornemann [2008] sprechen die Empfehlung aus, anstatt der traditionellen Euklidischen Vektornormen in Gl. (5.189)₂ eine möglichst glatte Norm, die ein skalares Fehlermaß liefert, zu definieren. Dem Vorschlag von Hairer et al. [1993, S. 167–168] folgend werden die relativen Fehlergrößen

$$\begin{aligned} e_u &:= \sqrt{\frac{1}{n_{\text{uu}}} \sum_{k=1}^{n_{\text{uu}}} \left(\frac{u_{\text{err}}^k}{\varepsilon_{\text{r}}^u |u_n^k| + \varepsilon_{\text{a}}^u} \right)^2}, & e_v &:= \sqrt{\frac{1}{n_{\text{uu}}} \sum_{k=1}^{n_{\text{uu}}} \left(\frac{v_{\text{err}}^k}{\varepsilon_{\text{r}}^v |v_n^k| + \varepsilon_{\text{a}}^v} \right)^2}, \\ e_{\Theta} &:= \sqrt{\frac{1}{n_{\Theta\text{u}}} \sum_{k=1}^{n_{\Theta\text{u}}} \left(\frac{\Theta_{\text{err}}^k}{\varepsilon_{\text{r}}^{\Theta} |\Theta_n^k| + \varepsilon_{\text{a}}^{\Theta}} \right)^2} \end{aligned} \quad (5.191)$$

für die Verschiebungen, Geschwindigkeiten und Temperaturen eingeführt. Die partiellen Fehlermaße (5.191) gewichten komponentenweise den k -ten Fehlerfreiheitsgrad der Vektoren $\mathbf{u}_{\text{err}} = \{u_{\text{err}}^1, \dots, u_{\text{err}}^{n_{\text{uu}}}\}$, $\mathbf{v}_{\text{err}} = \{v_{\text{err}}^1, \dots, v_{\text{err}}^{n_{\text{uu}}}\}$ und $\Theta_{\text{err}} = \{\Theta_{\text{err}}^1, \dots, \Theta_{\text{err}}^{n_{\Theta\text{u}}}\}$, siehe

Gl. (5.190), mit vorgegebenen absoluten und relativen Toleranzen für jede Feldvariable. Die Adaptierung einer Empfehlung von Ehlers und Ellsiepen [1998] und Diebels et al. [1999] führt für die inneren Variablen auf den Einsatz einer Maximumnorm

$$e_q := \max_{1 \leq k \leq n_Q} \left| \frac{q_{\text{err}}^k}{\varepsilon_r^q |q_n^k| + \varepsilon_a^q} \right|, \quad (5.192)$$

mit $\mathbf{q}_{\text{err}} = \{q_{\text{err}}^1, \dots, q_{\text{err}}^{n_Q}\}$.⁵⁵ Darüber hinaus ist es möglich, die vom Nutzer vorgegebenen relativen Fehlertoleranzen $\varepsilon_r^u, \varepsilon_r^v, \varepsilon_r^\Theta, \varepsilon_r^q$ und absoluten Fehlertoleranzen $\varepsilon_a^u, \varepsilon_a^v, \varepsilon_a^\Theta, \varepsilon_a^q$ zur Reflexion unterschiedlicher Größenordnungen und verschiedener physikalischer Interpretationen komponentenweise zu definieren, siehe z. B. [Hairer et al., 1993]. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden jedoch die aufgelisteten Toleranzen als konstant angenommen. Das Zusammenführen der partiellen, gewichteten Fehlermaße (5.191) und (5.192) erfolgt mittels

$$e_m = \max(e_u, e_v, e_\Theta, e_q). \quad (5.193)$$

Standardregler Der von Hairer et al. [1993] abgeleitete Standardregler nimmt damit die kompakte Gestalt

$$\Delta t_{\text{new}} = f_{\text{new}} \Delta t_n, \quad f_{\text{new}} = \begin{cases} \min(f_{\text{max}}, f_{\text{safety}} e_m^{-1/(\hat{p}+1)}) & \text{falls } e_m \leq 1 \\ \max(f_{\text{min}}, f_{\text{safety}} e_m^{-1/(\hat{p}+1)}) & \text{falls } e_m > 1 \end{cases} \quad (5.194)$$

an. Für den Fall $e_m \leq 1$ wird der aktuell berechnete Zeitschritt $[t_n, t_{n+1}]$ akzeptiert und die Zeitintegration fährt mit einem aus dem ersten Zweig von Gl. (5.194)₂ prognostizierten Δt_{new} fort. Alternativ führt der Vergleich $e_m > 1$ zu einer Verwerfung des gegenwärtigen Zeitschritts, sodass der Integrationsschritt erneut mit einer kleineren Schrittweite $\Delta t_{\text{new}} < \Delta t_n$ ausgeführt wird. Die Abweisung für Δt_n wiederholt sich solange bis ein weiteres Mal ein akzeptabler Zeitschritt, der durch die lokale Fehlerkontrolle als $e_m \leq 1$ identifiziert wird, gefunden ist. Der Zeitintegrationsprozess schreitet dann mit $\Delta t_{\text{new}} \rightarrow \Delta t_n$ fort. Während die Faktoren f_{min} und f_{max} aus Gl. (5.194) zu rasche Zu- und Abnahmen der Schrittweite blockieren, verhindert der Sicherheitsfaktor f_{safety} zu starke Oszillationen in der adaptiven Schrittweitenprozedur. Praktikable Parametrisierungen des Schrittweitenreglers, die einer starken Variation durch das berechnete Problem unterworfen sind, liegen in der Größenordnung $0.2 \leq f_{\text{min}} \leq 0.5$, $2 \leq f_{\text{max}} \leq 3$ und $0.8 \leq f_{\text{safety}} \leq 0.9$, siehe [Hairer et al., 1993, S. 167–168] und [Hairer und Wanner, 1996, S. 123–127]. Nach einem Vorschlag von Hairer et al. [1993, S. 124] ist auch anstatt eines konstanten Sicherheitsfaktors f_{safety} ein modifizierter Ansatz der Form

$$f_{\text{safety}} = 0.9 \times \frac{2n_{\text{Newt}}^{\text{max}} + 1}{2n_{\text{Newt}}^{\text{max}} + n_{\text{Newt}}} \quad (5.195)$$

in Abhängigkeit der für den Zeitschritt benötigten Anzahl globaler Newton-Iterationen n_{Newt} und der maximalen Anzahl von Newton-Iterationen $n_{\text{Newt}}^{\text{max}}$ vorstellbar.

⁵⁵Der lokalen Extrapolation, also dem Voranschreiten der Integrationsprozedur mit der Näherung höherer Ordnung, Rechnung tragend, werden die relativen Fehlertoleranzen $\varepsilon_r^u, \varepsilon_r^v, \varepsilon_r^\Theta$ und ε_r^q anstatt mit den Komponenten von $\hat{\mathbf{y}}_n = \{\hat{y}_n^1, \dots, \hat{y}_n^m\}$ mit u_n^k, v_n^k, Θ_n^k und q_n^k multiplikativ verknüpft.

Um viele kleine Veränderungen und damit einhergehende Oszillationen in der Schrittweite zu unterbinden, wird eine sogenannte tote Zone⁵⁶ in den Standardregler integriert. Liefert die Selektionsregel (5.194)₂ einen Wert für f_{new} innerhalb des unwirksamen Bereichs $\hat{f}_{\min} \leq f_{\text{new}} \leq \hat{f}_{\max}$, wird der Faktor f_{new} auf eins zurückgesetzt und Δt_n beibehalten. Wie diverse Autoren zeigen, siehe z. B. [Gustafsson et al., 1988; Gustafsson, 1992; Hairer und Wanner, 1996; Söderlind, 2002], führt eine an $f_{\text{new}} = 1$ ausgerichtete tote Zone, die lediglich Vergrößerungen der Schrittweite in diesem Sektor blockiert, zu einer Effizienzsteigerung des Standardreglers. In der Praxis ist es üblich, eine Ausdehnung von 20 % für den unwirksamen Bereich zu reservieren, d. h. $\hat{f}_{\min} = 1.0$ und $\hat{f}_{\max} = 1.2$. Die vollständige Kontrollstrategie des Standardreglers lässt sich in der Form

$$\begin{aligned} f_{\text{new}} &= \begin{cases} \min(f_{\max}, f_{\text{safety}} e_m^{-1/(\hat{p}+1)}) & \text{falls } e_m \leq 1 \\ \max(f_{\min}, f_{\text{safety}} e_m^{-1/(\hat{p}+1)}) & \text{falls } e_m > 1 \end{cases}, \\ \Delta t_{\text{new}} &= \Delta t_n \cdot \begin{cases} 1 & \text{falls } \hat{f}_{\min} \leq f_{\text{new}} \leq \hat{f}_{\max} \\ f_{\text{new}} & \text{andernfalls} \end{cases} \end{aligned} \quad (5.196)$$

zusammenfassen. Wie Gustafsson et al. [1988], Gustafsson [1991], Gustafsson [1992], Gustafsson [1994], Hairer et al. [1993] und Söderlind [2002] sehr anschaulich darlegen, kann die adaptive Selektionstechnik für die Schrittweite (5.196) auch als automatisches Steuerungsproblem mit einem diskreten Integralregler (I-Regler) aufgefasst werden.

PI-Regler Obwohl der im vorigen Paragraph erläuterte Standardregler zumeist sehr zuverlässig arbeitet, offenbart der lokale adaptive Fehlerschätzer in ausgeprägten transienten Phasen starke Schwankungen in der Schrittweitensequenz, siehe [Gustafsson et al., 1988; Gustafsson, 1991; Gustafsson, 1992; Gustafsson, 1994; Strehmel et al., 2012]. Ein Grund für die erwähnten Oszillationen sind die schlechten stabilisierenden Eigenschaften eines rein integrierenden Reglers, dessen zumeist zu große Integralverstärkung, ausgedrückt durch den Exponenten $1/(\hat{p} + 1)$ in Gl. (5.196), dieses Phänomen anfacht. Hinsichtlich einer Stabilisierung und Effizienzsteigerung der adaptiven Schrittweitenstrategie durch Generierung einer Schrittweitensequenz mit einer besseren Regularität und die Reduktion der Anzahl verworfener Zeitschritte wurden verschiedene Konzepte aus der Perspektive der Regelungstechnik zuerst von Gustafsson et al. [1988] und Gustafsson [1991] anhand expliziter Runge-Kutta Verfahren und später für implizite Runge-Kutta Verfahren in [Gustafsson, 1994] vorgestellt. Für einen ausführlichen Überblick zu dieser Thematik sei auch auf [Gustafsson, 1992; Söderlind, 2002; Söderlind und Wang, 2006b] referiert. Neuere, erweiterte Ansätze für adaptive Kontrollstrategien basierend auf der Anwendung digitaler Filter werden in [Söderlind, 2003; Söderlind und Wang, 2006a] und der dort zitierten Literatur vorgestellt.

Während der Standardregler ein konstantes Modell für $\|\hat{\Psi}(t_n, \mathbf{y}(t))\|$ annimmt und somit $C_{\text{new}} = C_n = \text{const.}$ impliziert, basiert der in der Pionierarbeit von Gustafsson et al. [1988] vorgestellte diskrete Proportional-Integral-Regler (PI-Regler) auf der realistische-

⁵⁶In der englischsprachigen Literatur ist von einer „dead zone“ die Rede.

ren Modellannahme $\log C_{\text{new}} = \log C_n + (\log C_n - \log C_{n-1})$.⁵⁷ Hieraus leitet Gustafsson [1994], siehe auch [Gustafsson, 1992; Hairer und Wanner, 1996; Lang, 2001; Söderlind, 2002; Rang, 2013a], für steife Probleme unter Voraussetzung der asymptotischen Fehlerabschätzung (5.187) die erheblich verbesserte Selektionsregel für die neue Schrittweite

$$\Delta t_{\text{new}} = \Delta t_n \min \left(f_{\max}, \left(f_{\min}, f_{\text{safety}} (e_m^{n+1})^{-\tilde{K}_I} (e_m^n / e_m^{n+1})^{\tilde{K}_P} \Delta t_n / \Delta t_{n-1} \right) \right) \quad (5.197)$$

ab, wobei der Einfluss des Proportionalglieds durch \tilde{K}_P und des Integralglieds durch \tilde{K}_I gesteuert werden kann.^{58,59} Neben Δt_n und dem Fehlermaß e_m^{n+1} des aktuellen Zeitschritts $[t_n, t_{n+1}]$ fließen in die Bestimmung von Δt_{new} mittels PI-Regler auch $\Delta t_{n-1} = t_n - t_{n-1}$ und das Maximum der gewichteten Fehlermaße $e_m^n = \max(e_u^n, e_v^n, e_\Theta^n, e_q^n)$ aus dem vorhergehenden Zeitschritt $[t_n, t_{n-1}]$ ein. Für weitere Details zur Herleitung von Gl. (5.197) sei auf [Gustafsson, 1992; Gustafsson, 1994; Söderlind, 2002] verwiesen.

Wie u. a. Gustafsson et al. [1988], Gustafsson [1991], Gustafsson [1994] und Söderlind [2002] anhand zahlreicher numerischer Beispiele demonstrieren, weist der diskrete PI-Regler bessere stabilisierende Eigenschaften als der konservative Standardregler auf. Durch eine Verzögerung des Ansprechverhaltens liefert dieser in ausgeprägten transienten Phasen eine glattere Schrittweitensequenz, was den Einsatz einer toten Zone, wie in Gl. (5.196), überflüssig macht. Allerdings führt mit Blick auf die Verwerfung von Zeitschritten das vorsichtige Prognostizieren eines Zeitschritts durch Gl. (5.197) zu einer erheblichen Stagnation, sodass an dieser Stelle zur Steigerung der Effizienz von Gustafsson [1994] der Gebrauch des Standardreglers empfohlen wird.

Im Rahmen der vorliegenden Monographie kommt eine von Gustafsson [1994] vorgeschlagene hybride PI-Schrittweitenregelung in der Form

$$\begin{aligned} \Delta t_{\text{new}} &= f_{\text{new}} \Delta t_n, \\ f_{\text{new}} &= \begin{cases} \min \left(f_{\max}, \max \left(f_{\min}, f_{\text{safety}} (e_m^{n+1})^{-\tilde{K}_I} \left(\frac{e_m^n}{e_m^{n+1}} \right)^{\tilde{K}_P} \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \right) \right) & \text{falls } e_m \leq 1 \\ \min \left(f_{\max}, \max \left(f_{\min}, f_{\text{safety}} (e_m^{n+1})^{-\tilde{K}_I} \right) \right) & \text{falls } e_m > 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5.199)$$

zum Einsatz, welche im Fall eines verworfenen Zeitschritts auf den schneller auf Änderungen des Lösungsverhaltens reagierenden Standardregler, siehe Gl. (5.196), bzw. im Fall eines akzeptierten Zeitschritts auf den stabilisierenden PI-Regler, siehe Gl. (5.197), zurückgreift. Die Integralverstärkung des Standardreglers ist analog zu Gl. (5.196) für

⁵⁷Die Integration eines zusätzlichen Differentialglieds in den Regler, sodass ein sogenannter PID-Regler resultiert, wurde von Gustafsson et al. [1988] ebenfalls studiert. Aufgrund der statisch agierenden Regelstrecke kann jedoch der Einfluss eines Differentialglieds vernachlässigt werden.

⁵⁸In der englischsprachigen Literatur, siehe z. B. [Gustafsson, 1994; Söderlind, 2002], wird für Gl. (5.197) häufig auch der Ausdruck „predictive controller“ verwendet.

⁵⁹Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass die stringente Umsetzung eines diskreten Proportional-Integral-Reglers nicht auf Gl. (5.197), sondern auf die Form

$$\Delta t_{\text{new}} = \Delta t_n \min \left(f_{\max}, \left(f_{\min}, f_{\text{safety}} (e_m^{n+1})^{-\tilde{K}_I} (e_m^n / e_m^{n+1})^{\tilde{K}_P} \right) \right) \quad (5.198)$$

führt, siehe hierzu auch [Gustafsson et al., 1988; Söderlind, 2002; Strehmel et al., 2012]. Die adaptive Schrittweitenkontrolle mittels Selektionsregel (5.198) eignet sich jedoch besser zur Anwendung auf nicht-steife Probleme.

den jeweils ersten verworfenen Zeitschritt durch $K_I = 1/(\hat{p} + 1)$ festgelegt. Um einen effizienten Neustart des hybriden PI-Reglers bei aufeinander folgenden Schrittweitenverwerfungen zu ermöglichen, wird der Verstärkungsfaktor K_I ab dem jeweils zweiten zurückgewiesenen Zeitschritt durch den Ausdruck

$$K_I = \max \left(0.1, \min \left(1/(\hat{p} + 1), \frac{\log(e_m^{n+1}/e_m^n)}{\log(\Delta t_n/\Delta t_{n-1})} \right) \right) \quad (5.200)$$

modifiziert. Weitere detaillierte Erläuterungen zur Implementierung sowie die Wahl der Parameter \tilde{K}_I , \tilde{K}_P und K_I sind [Gustafsson, 1992; Gustafsson, 1994; Hairer und Wanner, 1996; Lang, 2001] zu entnehmen.

Ein bisher nicht angesprochener, zentraler Aspekt liegt in der Berechnung von $\mathbf{y}_{\text{err}} = \hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1}$, siehe Gl.(5.185), bzw. in der Bestimmung der Näherungslösung $\hat{\mathbf{y}}_{n+1}$ des Verfahrens mit der Konsistenzordnung $\hat{p} = p - 1$. Eine vollständige Neuberechnung mit einem Integrator niedriger Ordnung wäre ineffizient und soll aus diesem Grund nicht weiter verfolgt werden. Eine in der Praxis bewährte Strategie zur adaptiven Schrittweitenkontrolle basiert auf sogenannten eingebetteten Verfahren, deren Konstruktion und Aufbau sich die nachfolgenden Abschnitte 5.2.6 und 5.2.7 im Rahmen der in den Abschnitten 5.2.1, 5.2.2 und 5.2.4 behandelten RK- und Generalized- α Methoden widmen.

5.2.6 Fehlerabschätzung mittels Runge-Kutta Verfahren

Zwar liefert die Richardson-Extrapolation⁶⁰ zumeist sehr verlässliche Schätzungen des lokalen Diskretisierungsfehlers, doch speziell RK-Verfahren sind prädestiniert diese Kernaufgabe innerhalb einer adaptiven Schrittweitenkontrolle mittels sogenannter eingebetteter Verfahren zu realisieren. Der Grundgedanke der Einbettung besteht darin, zwei Näherungslösungen \mathbf{y}_{n+1} und $\hat{\mathbf{y}}_{n+1}$ durch zwei s -stufige RK-Verfahren unterschiedlicher Konsistenzordnung mit identischem Knotenvektor c_i , $i = 1, \dots, s$, und gleicher Verfahrensmatrix a_{ij} , $i = 1, \dots, s$, $j = 1, \dots, s$, aber mit ungleichen Wichtungsfaktoren b_i und \hat{b}_i , $i = 1, \dots, s$, zu berechnen. Hierdurch fällt kein zusätzlicher numerischer Aufwand an, da sich beide Integrationsalgorithmen dieselben Stufenberechnungen teilen, d. h. auf gleiche Stufen- und Steigungswerte, \mathbf{Y}_{ni} und $\hat{\mathbf{Y}}_{ni}$, zurückgreifen. Die Gewichte \hat{b}_i des eingebetteten Verfahrens werden so gewählt, dass der analog zu Gl. (5.118) berechnete Näherungswert

$$\hat{\mathbf{y}}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \hat{\mathbf{Y}}_{ni} \quad (5.201)$$

⁶⁰Im Rahmen der Richardson-Extrapolation wird der Integrationsschritt mit Δt_n zur Berechnung der Näherung \mathbf{y}_{n+1} mit der halben Schrittlänge $\Delta t_n/2$ wiederholt. Aus der Differenzenbildung der mit zwei Schritten berechneten Approximation $\mathbf{y}_{n+2 \times \Delta t_n/2}$ und \mathbf{y}_{n+1} resultiert eine Abschätzung für den lokalen Diskretisierungsfehler, siehe auch [Hairer et al., 1993; Strehmel et al., 2012]. Im Vergleich zu den eingebetteten Verfahren zieht eine Fehlerabschätzung mittels Richardson-Extrapolation einen ungefähr um den Faktor drei größeren Rechenaufwand nach sich.

bzw. die in die einzelnen physikalischen Feldgrößen separierten Lösungsvektoren

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{u}}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \mathbf{V}_{ni}, & \hat{\mathbf{v}}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \mathbf{A}_{ni}, \\ \hat{\Theta}_{n+1} &= \Theta_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \dot{\Theta}_{ni}, & \hat{\mathbf{q}}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \dot{\mathbf{q}}_{ni}\end{aligned}\tag{5.202}$$

die Konsistenzordnung $\hat{p} = p - 1$ besitzen. Gemäß Gl. (5.185) ergibt sich für ein eingebettetes RK-Schema für \mathbf{y}_{err} , also für den approximierten Hauptteil des lokalen Diskretisierungsfehlers des RK-Verfahrens mit der Konsistenzordnung \hat{p} , die folgende Abschätzungsformel

$$\mathbf{y}_{\text{err}} := \hat{\mathbf{y}}_{n+1} - \mathbf{y}_{n+1} = \Delta t_n \sum_{i=1}^s (\hat{b}_i - b_i) \dot{\mathbf{y}}_{ni},\tag{5.203}$$

sodass die finalen Resultate (5.190) des a posteriori Fehlerschätzers nahezu ohne weiteren Rechenaufwand zur Verfügung stehen:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{u}}_{n+1} - \mathbf{u}_{n+1} = \Delta t_n \sum_{i=1}^s (\hat{b}_i - b_i) \mathbf{V}_{ni}, & \mathbf{v}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{v}}_{n+1} - \mathbf{v}_{n+1} = \Delta t_n \sum_{i=1}^s (\hat{b}_i - b_i) \mathbf{A}_{ni}, \\ \Theta_{\text{err}} &:= \hat{\Theta}_{n+1} - \Theta_{n+1} = \Delta t_n \sum_{i=1}^s (\hat{b}_i - b_i) \dot{\Theta}_{ni}, & \mathbf{q}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{q}}_{n+1} - \mathbf{q}_{n+1} = \Delta t_n \sum_{i=1}^s (\hat{b}_i - b_i) \dot{\mathbf{q}}_{ni}\end{aligned}\tag{5.204}$$

Das allgemeine Parameterschema eines eingebetteten steif-genauen DIRK-Verfahrens ist in Abschnitt D.1 visualisiert, wobei im Vergleich zu Abb. 5.4 jeweils in der letzten Zeile des Butcher-Tableaus die Koeffizienten \hat{b}_i , $i = 1, \dots, s$, angefügt sind. Tab. D.2 listet alle in der vorliegenden Arbeit verwendeten eingebetteten DIRK-Verfahren auf.

5.2.7 Fehlerabschätzung mittels Generalized- α Methode

Für eine möglichst verlässliche Fehlerabschätzung mittels der Generalized- α Methode soll ein Vorschlag von Rang [2013a] zur Anwendung kommen. In Übereinstimmung mit [Chung und Hulbert, 1993; Erlicher et al., 2002; Rang, 2013a] und den in Kapitel 6 durchgeführten numerischen Experimenten weisen die in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Einschnittversionen der Generalized- α Methode, siehe Abschnitt 5.2.4, eine Genauigkeitsordnung $p = 2$ auf. Das implizite Euler-Verfahren mit der Konsistenzordnung $\hat{p} = 1$ entspricht daher einem idealen Kandidaten zur Bestimmung einer Näherungslösung niedriger Ordnung:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{u}}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \Delta t_n \hat{\mathbf{v}}_{n+1}, & \hat{\mathbf{v}}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + \Delta t_n \hat{\mathbf{a}}_{n+1}, \\ \hat{\Theta}_{n+1} &= \Theta_n + \Delta t_n \hat{\dot{\Theta}}, & \hat{\mathbf{q}}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + \Delta t_n \hat{\dot{\mathbf{q}}}_{n+1}\end{aligned}\tag{5.205}$$

Um jedoch eine aufwendige Berechnung des in Tab. 5.1 zusammengefassten, gekoppelten ODE-Systems unter Verwendung des impliziten Euler-Verfahrens zu umgehen, werden die benötigten Ableitungen $\hat{\mathbf{v}}_{n+1}$, $\hat{\mathbf{a}}_{n+1}$, $\hat{\dot{\Theta}}$ und $\hat{\dot{\mathbf{q}}}_{n+1}$ durch die Beziehungen aus den

Gl. (5.146), (5.147), (5.159) und (5.168) approximiert. Der a posteriori Fehlerschätzer für die Generalized- α Methode basiert damit auf den folgenden Abschätzungsformeln:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{u}}_{n+1} - \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \mathbf{v}_{n+1} - \mathbf{u}_{n+1}, \\ \mathbf{v}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{v}}_{n+1} - \mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t_n \mathbf{a}_{n+1} - \mathbf{v}_{n+1}, \\ \Theta_{\text{err}} &:= \hat{\Theta}_{n+1} - \Theta_{n+1} = \Theta_n + \Delta t_n \dot{\Theta}_{n+1} - \Theta_{n+1}, \\ \mathbf{q}_{\text{err}} &:= \hat{\mathbf{q}}_{n+1} - \mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{q}_n + \Delta t_n \dot{\mathbf{q}}_{n+1} - \mathbf{q}_{n+1} \end{aligned} \quad (5.206)$$

5.3 Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme mittels Multilevel-Newton-Verfahren

Die Anwendung der im Abschnitt 5.2 vorgestellten impliziten Einschrittverfahren (Runge-Kutta Verfahren und Generalized- α Methoden) auf die in den Tab. 5.1, 5.3 und 5.5 angegebenen Differentialgleichungssysteme bzw. die in den Tab. 5.2 und 5.4 spezifizierten Differential-Algebraischen Gleichungssysteme führt auf die Lösung nichtlinearer algebraischer Gleichungssysteme. Bei Betrachtung eines thermomechanisch gekoppelten Problems in Kombination mit Konstitutivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp resultiert in Anlehnung an den durch ein DIRK-Verfahren zeitdiskretisierten Gleichungsblock (5.135) bzw. den durch die Generalized- α Methode zeitdiskretisierten Gleichungsblock (5.172) ein nichtlineares Gleichungssystem der verallgemeinerten Gestalt

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{L}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.207)$$

in Abhängigkeit des Knotenfreiheitsgradvektors $\mathbf{W}^T := \{\mathbf{U}^T, \Theta^T\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$, $n_{\text{xu}} = n_{\text{uu}} + n_{\Theta}$, und den inneren Variablen $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_{\text{Q}}}$, mit

$$\mathbf{G}^T(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) := \{\mathbf{G}_{\text{u}}^T(\mathbf{W}, \mathbf{Q}), \mathbf{G}_{\Theta}^T(\mathbf{W}, \mathbf{Q})\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}} \quad \text{und} \quad \mathbf{L}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{Q}}}.$$

Zur Vereinfachung entfällt in Gl. (5.207) der Index ni , der Größen der i -ten Stufe innerhalb der Verfahrensvorschrift eines DIRK-Verfahrens markiert. Analoge Verdichtungen der Schreibweise werden auf die Generalized- α Methode übertragen, sodass Gl. (5.207) durch Wegfall des Index $n + 1$ aus Gl. (5.172) hervorgeht.

Wie schon von Hartmann [2005] detailliert dargelegt, ist der Multilevel-Newton-Algorithmus bzw. das Mehrebenen-Newton-Verfahren die am weitesten verbreitete Methodik zur Lösung des nichtlinear blockstrukturierten Gleichungssystems (5.207). Dieses Verfahren, welches eine Variante des klassischen Newton-Raphson-Verfahrens darstellt und die spezielle Struktur von Gl. (5.207) effizient ausnutzt, wurde ursprünglich von Rabbat et al. [1979] für die Lösung von Differential-Algebraischen Gleichungssystemen, die bei der Berechnung ausgedehnter elektrischer Netzwerke auftreten, entwickelt. Auch im Kontext gleichheitsrestringierten Optimierungsverfahren wurde die iterative Lösungsprozedur in [Hoyer und Schmidt, 1984; Schmidt et al., 1985] und der dort zitierten Literatur erfolgreich angewendet. Die nachfolgend illustrierte iterative Lösungsmethodik zur sukzessiven Approximation der gesuchten Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems (5.207) zeichnet

sich unter Voraussetzung von Kontinuität und Regularität an die Jacobi-Matrix von Gl. (5.207) wie das klassische Newton-Raphson-Verfahren durch eine lokal quadratische Konvergenz in der Nähe der Lösung aus.

Der Multilevel-Newton-Algorithmus, welcher im Folgenden durch das Akronym MLNA abgekürzt werden soll, setzt die Gültigkeit des Satzes über implizite Funktionen voraus. Bezugnehmend auf das nichtlinear blockstrukturierte Gleichungssystem (5.207) sagt der Satz über implizite Funktionen aus, dass unter der Annahme einer genügend glatten Funktion $\mathbf{L}(\mathbf{W}, \mathbf{Q})$ in der Nähe der gesuchten Lösung von Gl. (5.207) eine Abbildung $\mathbf{Q} = \tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W})$ existiert, die aus der lokal eindeutigen Auflösung von $\mathbf{L}(\mathbf{W}, \mathbf{Q})$ nach den inneren Variablen \mathbf{Q} hervorgeht.⁶¹ Durch das Einsetzen der expliziten Funktionsdeklaration $\mathbf{Q} = \tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W})$ folgt ein nichtlineares Gleichungssystem in Abhängigkeit der Primärvariablen $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$:

$$\mathbf{G}(\mathbf{W}, \tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W})) = \mathbf{0} \quad (5.208)$$

Die Anwendung des klassischen Newton-Raphson Schemas auf Gl. (5.208) liefert für jeden Iterationsschritt (m) das lineare Gleichungssystem

$$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{W}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\tilde{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} \right]_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{W}^{(m)} = -\mathbf{G}(\mathbf{W}^{(m)}, \tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)})), \quad \mathbf{y}^{(m)} := \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{W}^{(m)} \\ \tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)}) \end{array} \right\}. \quad (5.209)$$

Die Matrix auf der linken Seite von Gl. (5.209) repräsentiert die sogenannte konsistente Tangentenmatrix, deren Namensgebung auf die durch Simo und Taylor [1985] geprägte Terminologie zurückzuführen ist. Für das vollständig gekoppelte thermomechanische System werden in in dieser globalen Funktionalmatrix Ableitungen der räumlich und zeitlich diskretisierten schwachen Formen für die Impulsbilanz und der Wärmeleitungsgleichung bezüglich der Verschiebungen, der Temperaturen und der inneren Variablen sowie die implizite Ableitung $d\tilde{\mathbf{Q}}/d\mathbf{W}$ kombiniert. Die im Rahmen der konsistenten Linearisierung entwickelten globalen Funktionalmatrizen besitzen in Komponentenform den Aufbau

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{W}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{U}} & \frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \Theta} \\ \frac{\partial \mathbf{G}_\Theta}{\partial \mathbf{U}} & \frac{\partial \mathbf{G}_\Theta}{\partial \Theta} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{xu} \times n_{xu}}, \quad \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{Q}} \\ \frac{\partial \mathbf{G}_\Theta}{\partial \mathbf{Q}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{xu} \times n_Q} \quad (5.210)$$

und

$$\frac{d\tilde{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} = [d\tilde{\mathbf{Q}}/d\mathbf{U} \quad d\tilde{\mathbf{Q}}/d\Theta] \in \mathbb{R}^{n_Q \times n_{xu}}. \quad (5.211)$$

⁶¹Eine mathematisch präzisere Interpretation des Satzes über implizite Funktionen liefert die folgende Aussage. Nach Burg et al. [2017, S. 512–517] existiert unter den Voraussetzungen $\mathbf{L}(\mathbf{W}_0, \mathbf{Q}_0) = \mathbf{0}$, mit $(\mathbf{W}_0, \mathbf{Q}_0) \in \mathbb{R}^{n_{xu}} \times \mathbb{R}^{n_Q}$, und einer innerhalb einer zu $(\mathbf{W}_0, \mathbf{Q}_0)$ angrenzenden Umgebung $\mathcal{U}_0 \subseteq \mathbb{R}^{n_{xu}}$, $\mathcal{V}_0 \subseteq \mathbb{R}^{n_Q}$, \mathcal{C}^1 -kontinuierlichen Funktion $\mathbf{L} : \mathbb{R}^{n_{xu}} \times \mathbb{R}^{n_Q} \rightarrow \mathbb{R}^{n_Q}$, sowie einer regulären, invertierbaren Ableitung $\partial \mathbf{L}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) / \partial \mathbf{Q}|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_0, \mathbf{Q}=\mathbf{Q}_0}$ eine lokal eindeutige Abbildung $\tilde{\mathbf{Q}} : \mathcal{U}_0 \rightarrow \mathcal{V}_0$, sodass für alle $\mathbf{W} \in \mathcal{U}_0$, $\mathbf{Q} \in \mathcal{V}_0$

$$\mathbf{L}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) = \mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{Q} = \tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}) \quad \text{gilt.}$$

Bevor das lineare Gleichungssystem (5.209) nach dem Inkrement $\Delta \mathbf{W}^{(m)}$ aufgelöst werden kann, müssen Vorschriften für die zwei noch nicht näher spezifizierten Größen $\tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ und $d\tilde{\mathbf{Q}}/d\mathbf{W}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_Q \times n_{xu}}$ angegeben werden. Obwohl, wie bereits oben angemerkt, die Funktion $\tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W})$ existiert, ist deren explizite Bestimmung im Allgemeinen nicht möglich. Daher findet eine Ersetzung von $\tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)})$ durch die zum nächsten Iterationsschritt $(m+1)$ aktualisierten inneren Variablen $\mathbf{Q}^{(m+1)}$ statt. Diese werden durch die numerische Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems (5.207)₂, zumeist mit Hilfe eines weiteren klassischen Newton-Verfahrens, für ein vorgegebenes $\mathbf{W}^{(m)}$ bestimmt:⁶²

$$\mathbf{L}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \quad \mathbf{Q}^{(m+1)} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)}) \quad (5.212)$$

Der lediglich aus formalen Gründen (wg. der Nomenklatur) eingeführte Operator $\hat{\mathbf{Q}}$ soll für die folgenden Ausführungen den durch Gl. (5.212)₁ wiedergegebenen, iterativ ablaufenden Berechnungsschritt als $\mathbf{Q}^{(m+1)} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)})$ abbilden. Dem Übergang von $\tilde{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)})$ zu $\mathbf{Q}^{(m+1)} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)})$ Rechnung tragend, müssen die Gl. (5.208) und (5.209) auf die Form

$$\mathbf{G}(\mathbf{W}, \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{W})) = \mathbf{0} \quad (5.213)$$

und

$$\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{W}^{(m)} = -\mathbf{G}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}), \quad (5.214)$$

mit der an der Stelle $\mathbf{y}^{(m)\text{T}} := \{\mathbf{W}^{(m)\text{T}}, \mathbf{Q}^{(m+1)\text{T}}\}$ ausgewerteten Funktionalmatrix

$$\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{W}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{xu} \times n_{xu}}, \quad (5.215)$$

adaptiert werden. Neben der Bestimmung von $\mathbf{Q}^{(m+1)} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ erfordert die Assemblierung der Tangentenmatrix auf globaler Ebene innerhalb der aktuellen Iteration (m) die Definition der Ableitung $d\hat{\mathbf{Q}}/d\mathbf{W}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_Q \times n_{xu}}$, $d\hat{\mathbf{Q}}/d\mathbf{W} = \begin{bmatrix} d\hat{\mathbf{Q}}/d\mathbf{U} & d\hat{\mathbf{Q}}/d\boldsymbol{\Theta} \end{bmatrix}$, an der Stelle $\mathbf{y}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{xu}+n_Q}$. Diese wird durch Substitution von $\mathbf{Q}^{(m+1)} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)})$ in Gl. (5.212), sodass hieraus

$$\mathbf{L}(\mathbf{W}^{(m)}, \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{W}^{(m)})) = \mathbf{0} \quad (5.216)$$

hervorgeht, und Bilden der totalen Ableitung der Beziehung (5.216) in Bezug auf \mathbf{W} ermittelt. Die Anwendung der Kettenregel führt auf den Ausdruck

$$\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{W}} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} = -\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{W}} \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}}. \quad (5.217)$$

Die Lösung des linearen Gleichungssystems (5.217)₂ mit mehreren rechten Seiten, zu dessen Konstruktion zunächst die partiellen Ableitungen $\partial \mathbf{L}/\partial \mathbf{W}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_Q \times n_{xu}}$ und $\partial \mathbf{L}/\partial \mathbf{Q}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_Q \times n_Q}$ determiniert werden müssen, vervollständigt das Aufstellen einer

⁶²Aus dem Verschachteln mehrerer klassischer Newton-Raphson-Verfahren leitet sich die Bezeichnung Mehrebenen-Newton- bzw. Multilevel-Newton-Algorithmus ab. Für den konkret erläuterten Anwendungsfall ist der Terminus Zweiebenen-Newton-Verfahren ebenfalls zutreffend.

Berechnungsvorschrift für $d\hat{\mathbf{Q}}/d\mathbf{W}|_{\mathbf{y}^{(m)}}$. Bezogen auf eine thermomechanisch gekoppelte Problemstellung besitzt die partielle Ableitung $\partial\mathbf{L}/\partial\mathbf{W}$ in Komponentenform den Aufbau

$$\partial\mathbf{L}/\partial\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\mathbf{U}} & \frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\Theta} \end{bmatrix}, \quad (5.218)$$

sodass Gl. (5.217) in

$$\left[\begin{bmatrix} \frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\mathbf{U}} & \frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\Theta} \end{bmatrix} + \frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\hat{\mathbf{Q}}} \begin{bmatrix} \frac{\partial\hat{\mathbf{Q}}}{\partial\mathbf{U}} & \frac{\partial\hat{\mathbf{Q}}}{\partial\Theta} \end{bmatrix} \right] \Big|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \mathbf{0} \Rightarrow \left[\frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\hat{\mathbf{Q}}} \begin{bmatrix} \frac{\partial\hat{\mathbf{Q}}}{\partial\mathbf{U}} & \frac{\partial\hat{\mathbf{Q}}}{\partial\Theta} \end{bmatrix} \right] \Big|_{\mathbf{y}^{(m)}} = - \left[\begin{bmatrix} \frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\mathbf{U}} & \frac{\partial\mathbf{L}}{\partial\Theta} \end{bmatrix} \right] \Big|_{\mathbf{y}^{(m)}}$$

überführt wird.

Bezugnehmend auf die mathematische Grundstruktur der behandelten Gleichungen sind die inneren Variablen als auch die zeitdiskretisierten Evolutionsgleichungen des Materialmodells auf Gauß-Punkt- bzw. Quadraturebene untereinander entkoppelt, siehe hierzu Abschnitt 5.1, und nur formal zur Demonstration der gesamtheitlichen DIRK/MLNA bzw. Gen- α /MLNA Lösungsprozedur in globale Spaltenvektoren

$$\mathbf{Q} = \sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} \mathbf{Z}_{\mathbf{q}}^{e(k)\text{T}} \mathbf{q}^{e(k)} \Leftrightarrow \mathbf{q}^{e(k)} = \mathbf{Z}_{\mathbf{q}}^{e(k)} \mathbf{Q}, \quad \mathbf{q}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\mathbf{q}}}, \quad (5.219)$$

und

$$\mathbf{L}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) = \sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} \mathbf{Z}_{\mathbf{q}}^{e(k)\text{T}} \mathbf{L}^{e(k)}(\mathbf{E}^{e(k)}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{L}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\mathbf{q}}} \quad (5.220)$$

zusammengefasst. Daher lassen sich die einzelnen Berechnungsschritte (5.212) und (5.217) auf die Abstraktionsebene eines Integrationspunktes (k) , $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, innerhalb des Elements e , $e = 1, \dots, n^e$, herunterbrechen. In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, dass Hartmann [1998] als Erster die auf lokale Ebene abstrahierte MLNA-Version mit der klassisch propagierten Struktur des iterativ auf Gauß-Punktebene behandelten Spannungsalgorithmus und den durch Simo und Taylor [1985] geprägten Begriff des konsistenten Tangentenoperators fokussiert zusammenführt, siehe auch [Ellsiepen und Hartmann, 2001; Hartmann, 2003; Hartmann, 2004; Hartmann, 2005]. Ausgehend von einem geometrisch nichtlinearen Konstitutivmodell der Darstellung (5.44) und (5.55), das die in Gl. (5.220) angegebenen Abhängigkeiten $\mathbf{E}^{e(k)} \in \mathbb{R}^6$, $\Theta^{e(k)}$, $\mathbf{q}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\mathbf{q}}}$ impliziert, berechnen sich gemäß Abschnitt 5.1 die an den Integrationspunkten räumlich interpolierten Verzerrungs- und Temperaturgrößen zu

$$\mathbf{E}^{e(k)} = \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}}^{e(k)} \mathbf{U}^e = \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}}^{e(k)} \{ \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^e \mathbf{U} + \bar{\mathbf{Z}}_{\mathbf{u}}^e \bar{\mathbf{U}}(T) \}$$

und

$$\Theta^{e(k)} = \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)\text{T}} \Theta^e = \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)\text{T}} \{ \mathbf{Z}_{\Theta}^e \Theta + \bar{\mathbf{Z}}_{\Theta}^e \bar{\Theta}(T) \},$$

mit der am Quadraturpunkt (k) , $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, im Element e , $e = 1, \dots, n^e$, ausgewerteten Verzerrungs-Verschiebungsmatrix $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{u}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{6 \times n_{\mathbf{u}}^e}$, dem Ansatzfunktionsvektor

$\mathbf{N}_\Theta^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e}$, den Zuordnungsmatrizen $\mathbf{Z}_u^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{uu}}$ und $\mathbf{Z}_\Theta^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_{\Theta u}}$, den elementbezogenen Freiheitsgradvektoren $\mathbf{U}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e}$ und $\mathbf{\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e}$ sowie den zum Zeitpunkt $T = T_{ni}$ bzw. $T = T_{n+\alpha_f}$ evaluierten Randbedingungen $\bar{\mathbf{u}}(T) \in \mathbb{R}^{n_{up}}$ und $\bar{\mathbf{\Theta}}(T) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta p}}$. In einer realen Umsetzung der Gl. (5.212) und (5.217) werden an einem Gauß-Punkt (k), $k = 1, \dots, n_{GP}^e$, innerhalb des Elements e , $e = 1, \dots, n^e$, lediglich die folgenden lokalen Systeme niedriger Dimension für den in der Zeit diskretisierten Spannungsalgorithmus

$$\mathbf{L}^{e(k)}(\mathbf{E}^{e(k)(m)}, \mathbf{\Theta}^{e(k)(m)}, \mathbf{q}^{e(k)(m+1)}) = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_q} \quad \rightsquigarrow \quad \mathbf{q}^{e(k)(m+1)} = \hat{\mathbf{q}}^{e(k)}(\mathbf{E}^{e(k)(m)}, \mathbf{\Theta}^{e(k)(m)}) \quad (5.221)$$

und im Rahmen der auf lokaler Ebene durchgeführten impliziten Differentiation

$$\left[\frac{\partial \mathbf{L}^{e(k)}}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \left[\frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\mathbf{E}^{e(k)}} \quad \frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\mathbf{\Theta}^{e(k)}} \right] \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{e(k)(m)}} = - \left[\frac{\partial \mathbf{L}^{e(k)}}{\partial \mathbf{E}^{e(k)}} \quad \frac{\partial \mathbf{L}^{e(k)}}{\partial \mathbf{\Theta}^{e(k)}} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{e(k)(m)}}, \quad (5.222)$$

das aus

$$\begin{aligned} & \left[\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} \quad \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{\Theta}} \right] + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{U}} \quad \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{\Theta}} \right] \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \\ & \sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} \left[\mathbf{z}_q^{e(k)T} \left[\frac{\partial \mathbf{L}^{e(k)}}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \left[\frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\mathbf{E}^{e(k)}} \quad \frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\mathbf{\Theta}^{e(k)}} \right] \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{e(k)(m)}} + \right. \\ & \left. \left[\frac{\partial \mathbf{L}^{e(k)}}{\partial \mathbf{E}^{e(k)}} \quad \frac{\partial \mathbf{L}^{e(k)}}{\partial \mathbf{\Theta}^{e(k)}} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{e(k)(m)}} \right] \left[\begin{array}{cc} \tilde{\mathbf{B}}_u^{e(k)} \mathbf{Z}_u^e & \mathbf{0}_{6 \times n_{uu}} \\ \mathbf{0}_{1 \times n_{\Theta u}} & \mathbf{N}_\Theta^{e(k)T} \mathbf{Z}_\Theta^e \end{array} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{e(k)(m)}} \right] = \mathbf{0} \end{aligned}$$

resultiert, gelöst.⁶³ Es ist offensichtlich, dass in die auf lokaler Ebene stattfindenden Auswertungen (5.221) und (5.222) lediglich Verschiebungs- und Temperaturfreiheitsgrade auf Elementebene, $\mathbf{U}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e}$ und $\mathbf{\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e}$, involviert sind und an der Stelle $\mathbf{y}^{e(k)(m)T} := \{\mathbf{W}^{e(m)T}, \mathbf{q}^{e(k)(m+1)T}\} \in \mathbb{R}^{n_u^e + n_\Theta^e + n_q}$, mit $\mathbf{W}^{e(m)T} := \{\mathbf{U}^{e(m)T}, \mathbf{\Theta}^{e(m)T}\} \in \mathbb{R}^{n_u^e + n_\Theta^e}$, stattfinden. Der an jedem Gauß-Punkt der Struktur mittels eines impliziten Einschrittverfahrens durchgeführte lokale Integrationsschritt, welcher das nichtlineare Gleichungssystem (5.221) zur Bestimmung der aktualisierten inneren Variablen $\mathbf{q}^{e(k)(m+1)T} \in \mathbb{R}^{n_q}$ impliziert und damit gemäß der Spannungsbeziehung (5.44) den Spannungszustand determiniert, trägt auch die Bezeichnung Spannungsalgorithmus. Für eine detaillierte Beschreibung und Implementierung des vom jeweiligen Materialmodell abhängigen Spannungsalgorithmus sei auf die zu dem entsprechenden Konstitutivmodell in Abschnitt 2.5.3 angegebene Literatur verwiesen.

Abhängig von der Komplexität des verwendeten Konstitutivmodell und der betrachteten Problemgröße kann die iterative Lösung von Gl. (5.221) für $e = 1, \dots, n^e$, $k =$

⁶³Zur numerischen Lösung der nichtlinearen lokalen Systeme (5.221) niedriger Dimension eignen sich prinzipiell jedoch auch alternative Fixpunktiterationsverfahren. Um beispielsweise die Robustheit des in [Erbts et al., 2015; Rothe et al., 2015a] vorgestellten thermoviskoplastischen Spannungsalgorithmus zu steigern, findet zur Berechnung der inneren Variablen $\mathbf{q}^{e(k)}$, vgl. Gl. (5.221), das Pegasus-Verfahren, siehe [Engeln-Müllges und Reutter, 1986], Anwendung. Obwohl die Begriffsdeklaration des Multilevel-Newton-Verfahrens damit nur noch eingeschränkt passend erscheint, soll die Richtigstellung bezogen auf den jeweiligen Kontext dem Leser überlassen werden.

$1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, sowie die Durchführung der konsistenten Linearisierung (5.222) für alle Integrationspunkte der Struktur einen beachtlichen Teil der totalen Rechenzeit beanspruchen, siehe z. B. [Hartmann et al., 2009a]. Aufgrund der existierenden Entkopplung können diese Berechnungsschritte jedoch leicht parallelisiert werden. Da in Zeiten moderner Mehrkernprozessoren und hoch parallelisierter Rechnerverbünde⁶⁴ zeitgemäße FEM-Programm-Codes ohnehin den Berechnungsaufwand zum Aufstellen des globalen linearen Gleichungssystems (5.214), d. h. der Funktionalmatrix und der rechten Seite, in Form einer parallelisierten Schleife über alle Elemente der Struktur verteilen, ist eine Einbettung der lokalen Operationen für das Multilevel-Newton-Verfahren in das parallele Ablaufschema unkompliziert möglich, siehe hierzu auch [Jarzebski et al., 2015]. Solche Programme zeichnen sich zumeist durch die Eigenschaft einer ausgezeichneten Skalierbarkeit aus.

Nach dem Zusammenbau des aus der konsistenten Linearisierung stammenden globalen, linearen Gleichungssystems (5.214) wird dieses nach dem Zuwachs $\Delta \mathbf{W}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$ aufgelöst. Mittels dem Inkrement $\Delta \mathbf{W}^{(m)}$ kann der zu Beginn des iterativen Lösungsprozesses geschätzte Startwert $\mathbf{W}^{(0)}$ sukzessive verbessert werden. Die Aktualisierung erfolgt in der Gestalt

$$\mathbf{W}^{(m+1)} = \mathbf{W}^{(m)} + \Delta \mathbf{W}^{(m)}. \quad (5.223)$$

Die skizzierte Prozedur wiederholt sich solange bis ein vom Nutzer vorgeschriebenes Konvergenzkriterium, siehe hierzu exemplarisch [Kuhl, 1996; Belytschko et al., 2000; Bathe, 2002; Quint, 2012; Zienkiewicz et al., 2014], erfüllt ist. Tab. 5.8 fasst den gesamten iterativen Lösungsalgorithmus mit der Unterscheidung in lokale und globale Ebene noch einmal zusammen.

Anmerkung 3 Obwohl der in diesem Unterabschnitt vorgestellte Multilevel-Newton-Algorithmus dem auf das blockstrukturierte nichtlineare Gleichungssystem (5.207) angewendete Newton-Raphson-Verfahren ähnelt, siehe [Hartmann, 2003; Hartmann, 2005], ist das MLNA mit dem zuletzt genannten Algorithmus nicht identisch. In [Ellsiepen und Hartmann, 2001] wurde gezeigt, dass die klassische Terminologie der Anwendung der Newton-Raphson-Methode durch Simo und Taylor [1985] irrtümlicherweise Eingang in die wissenschaftlichen Diskussionen gefunden hat und sich seitdem sehr beständig behauptet. Das „reine“ Newton-Raphson-Verfahren findet lediglich Anwendung, wenn auf Gauß-Punktebene keine nichtlinearen Gleichungen, wie z. B. im Fall der Elastizität, zu lösen sind sowie der konsistente Linearisierungsschritt (5.217) zum Aufstellen von $d\hat{\mathbf{Q}}/d\mathbf{W}|_{\mathbf{y}^{(m)}}$ entfällt.⁶⁵ Der Vollständigkeit halber sei angemerkt, dass die sogenannte Newton-Schur-Methode, siehe hierzu [Hartmann, 2003; Kulkarni et al., 2007; Vejchodský und Šolín, 2008], eine aussichtsreiche Alternative zur Lösung des blockstrukturierten nichtlinearen Gleichungssystems (5.207) repräsentiert. Die Newton-Schur-Methode basiert auf der Applikation des klassischen Newton-Raphson-Verfahrens auf Gl. (5.207) und

⁶⁴Gemeint sind hier sogenannte „High-Performance-Computing-Cluster“ (HPC-Cluster), die zu einer progressiven Erhöhung der verfügbaren Rechenkapazität in den letzten Dekaden geführt haben.

⁶⁵Dies schließt nicht notwendigerweise die Präsenz von inneren Variablen aus. So kann beispielsweise im Fall von linearen Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen, wie beispielsweise im Fall der linearen Viskoelastizität, eine geschlossene analytische Lösung angegeben werden, die es gestattet, den zeitdiskretisierten Spannungsalgorithmus und die Spannungsbeziehung in explizite Funktionsauswertungen in Abhängigkeit von Verzerrungen und Temperaturen zusammenzuführen.

Tabelle 5.8: Ablaufschema für das Multilevel-Newton-Verfahren (MLNA) zur Lösung des nichtlinear blockstrukturierten Gleichungssystems (5.135) in der i -ten Stufe eines DIRK-Verfahrens bzw. des aus der Zeitdiskretisierung mittels der Generalized- α Methode resultierenden nichtlinear blockstrukturierten Gleichungssystems (5.172), verallgemeinert anhand der Gleichungsstruktur (5.207)

Gegeben: Startvektorabschätzung ^a für $\mathbf{W}^{(0)}$ und $\mathbf{Q}^{(0)}$, mit $\mathbf{Q}^{(0)} = \mathbf{Q}^S$	
Parameter zum Aufstellen von Gl. (5.135) (DIRK): $\Delta t_n, T_{ni}, a_{ii}, \bar{a}_{ii}, \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S, \mathbf{U}_{ni}^S, \Theta_{ni}^S, \mathbf{Q}_{ni}^S$	
Parameter zum Aufstellen von Gl. (5.172) (Gen- α): $\Delta t_n, t_n, \alpha_f, \alpha_m, \beta, \gamma, \mathbf{u}_n, \mathbf{v}_n, \mathbf{a}_n, \Theta_n, \dot{\Theta}_n, \mathbf{q}_n, \dot{\mathbf{q}}_n$	
Wiederhole $m = 0, \dots$	
<i>Lokale Ebene (Quadratur- bzw. Gauß-Punktebene)</i> Gegeben: $\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)} = \mathbf{Q}^{(m)}, \mathbf{y}^{(m)T} := \{\mathbf{W}^{(m)T}, \mathbf{Q}^{(m+1)T}\}$ Löse nichtlineares Gleichungssystem für lokalen Integrationsschritt $\mathbf{L}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \rightsquigarrow \mathbf{Q}^{(m+1)}$ Konsistente Linearisierung mit aktual. $\mathbf{y}^{(m)T} := \{\mathbf{W}^{(m)T}, \mathbf{Q}^{(m+1)T}\}$ $\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} \right] \Big _{\mathbf{y}^{(m)}} = - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{W}} \Big _{\mathbf{y}^{(m)}} \rightsquigarrow \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} \Big _{\mathbf{y}^{(m)}}$	
<i>Globale Ebene</i> Löse globales, lineares Gleichungssystem $\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{W}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{W}} \right] \Big _{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{W}^{(m)} = -\mathbf{G}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \rightsquigarrow \Delta \mathbf{W}^{(m)}$ Aktualisierung der globalen Variablen $\mathbf{W}^{(m+1)} = \mathbf{W}^{(m)} + \Delta \mathbf{W}^{(m)} \rightsquigarrow \mathbf{W}^{(m+1)}$	
Bis Konvergenzkriterium erfüllt ist	

^aWährend die Startvektorabschätzung $\mathbf{W}^{(0)}$ aus einer linearen Extrapolation von Knotenfreiheitsgradvektoren zurückliegender Zeitschritte bzw. im Fall von DIRK-Verfahren zurückreichender Stufen hervorgeht, siehe hierzu [Hartmann et al., 2009a; Quint, 2012; Erbs und Düster, 2012; Erbs et al., 2015], fällt die Wahl für den Startvektor der inneren Variablen $\mathbf{Q}^{(0)}$ auf den im Rahmen der Zeitintegration aufgestellten Startwert \mathbf{Q}^S , d. h. für DIRK-Verfahren ist $\mathbf{Q}^S = \mathbf{Q}_{ni}^S$ und für Gen- α -Methoden ist $\mathbf{Q}^S = \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}^S$. Der Einsatz einer linearen Extrapolation zur Generierung des Startwerts $\mathbf{W}^{(0)}$ reduziert die Anzahl benötigter globaler Newton-Iterationen zum Erreichen des Konvergenzziels und führt somit zu niedrigeren Berechnungszeiten.

der statischen Kondensation des Inkrements in den inneren Variablen $\Delta \mathbf{Q}^{(m)}$ aus dem resultierenden globalen, linearen Gleichungssystem. Die Bezeichnung der iterativen Lösungsprozedur entspringt der Äquivalenz zwischen der statischen Kondensationsoperation für $\Delta \mathbf{Q}^{(m)}$ in Kombination mit der Substitution von $\Delta \mathbf{Q}^{(m)}$ in die verbleibende linearisierte Gleichung und der Konstruktion des sogenannten Schur-Komplements. Dieser aus einzelnen Funktionalmatrizen verknüpfte lineare Gleichungssystemoperator ist im Vergleich zum MLNA, bis auf die Auswertung an der Stelle $\mathbf{y}^{(m)}$, identisch mit der Tangentenmatrix (5.215). Bei Abwesenheit von inneren Variablen gehen das Newton-Schur- und das Mehrebenen-Newton-Verfahren in die klassische Newton-Raphson-Methode über.

5.4 Konsistente Linearisierung

Nachdem im vorhergehenden Abschnitt die Applikation des Multilevel-Newton-Algorithmus auf das allgemeine nichtlineare Gleichungssystem (5.207) besprochen wurde, soll im Folgenden der Fokus auf der Aufstellung der für das linearisierte Gleichungssystem (5.214) benötigten Ableitungen liegen. Die im Rahmen der thermomechanisch gekoppelten Theorie induzierte Partitionierung, siehe z. B. Gl. (5.134), hat in Bezug auf die globale Funktionalmatrix (5.215) die Zerlegung

$$\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\Theta} \\ \mathbf{K}_{\Theta u} & \mathbf{K}_{\Theta\Theta} \end{bmatrix} \Big|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{(n_{uu}+n_{\Theta u}) \times (n_{uu}+n_{\Theta u})} \quad (5.224)$$

zur Folge. Damit führt der auf globaler Ebene arrangierte Newton-Schritt (5.214) auf das unterteilte lineare Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\Theta} \\ \mathbf{K}_{\Theta u} & \mathbf{K}_{\Theta\Theta} \end{bmatrix} \Big|_{\mathbf{y}^{(m)}} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \Theta^{(m)} \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}^{(m)}, \Theta^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \\ \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{U}^{(m)}, \Theta^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \end{Bmatrix}, \quad (5.225)$$

mit $\mathbf{y}^{(m)\text{T}} := \{\mathbf{U}^{(m)\text{T}}, \Theta^{(m)\text{T}}, \mathbf{Q}^{(m+1)\text{T}}\}$, sowie der aus den Gl. (5.132)₁ und Gl. (5.132)₂ für ein DIRK-Verfahren bzw. den Gl. (5.150) und (5.163) für die Generalized- α Methode bestehenden rechten Seite. Letztere wird im Folgenden durch den Ausdruck

$$\mathbf{G}^{\text{T}}(\mathbf{U}^{(m)}, \Theta^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) := \{\mathbf{G}_u^{\text{T}}(\mathbf{U}^{(m)}, \Theta^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}), \mathbf{G}_\Theta^{\text{T}}(\mathbf{U}^{(m)}, \Theta^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)})\}$$

verallgemeinert. In den Gl. (5.224) und (5.225) kennzeichnen die innerhalb eines monolithischen Lösungskonzepts benötigten Funktionalmatrizen $\mathbf{K}_{uu} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}$, $\mathbf{K}_{u\Theta} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{\Theta u}}$, $\mathbf{K}_{\Theta u} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{uu}}$ und $\mathbf{K}_{\Theta\Theta} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}}$ totale Ableitungen der Residuenvektoren

$$\mathbf{G}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}} \quad \text{und} \quad \mathbf{G}_\Theta(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$$

nach den Primärvariablen, d. h. den unbekannten Knotenverschiebungen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und den unbekannten Knotentemperaturen $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$.⁶⁶ Sie sind definiert als

$$\mathbf{K}_{uu}|_{\mathbf{y}^{(m)}} := \left. \frac{d\mathbf{G}_u}{d\mathbf{U}} \right|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{U}} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}, \quad (5.226)$$

$$\mathbf{K}_{u\Theta}|_{\mathbf{y}^{(m)}} := \left. \frac{d\mathbf{G}_u}{d\Theta} \right|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \Theta} + \frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\Theta} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{\Theta u}}, \quad (5.227)$$

$$\mathbf{K}_{\Theta u}|_{\mathbf{y}^{(m)}} := \left. \frac{d\mathbf{G}_{\Theta}}{d\mathbf{U}} \right|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}_{\Theta}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}_{\Theta}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{U}} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{uu}}, \quad (5.228)$$

$$\mathbf{K}_{\Theta\Theta}|_{\mathbf{y}^{(m)}} := \left. \frac{d\mathbf{G}_{\Theta}}{d\Theta} \right|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}_{\Theta}}{\partial \Theta} + \frac{\partial \mathbf{G}_{\Theta}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\Theta} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}}. \quad (5.229)$$

Der elementbezogene Zusammenbau der linearisierten Anteile (5.226) bis (5.229) ist Gegenstand der in den anschließenden Paragraphen geführten Diskussionen. Die dort angegebenen Ausdrücke werden mit Hilfe des Konzepts der Richtungsableitung bzw. des Gateaux-Differentials gewonnen.

Als Ausgangspunkt für das Aufstellen der globalen Funktionaloperatoren (5.226) bis (5.229) muss in Abhängigkeit des verwendeten Zeitdiskretisierungsverfahrens (diagonal-implizit Runge-Kutta Verfahren (DIRK) oder Generalized- α Methode (Gen- α)) für jede Teilmatrix eine Fallunterscheidung in Gestalt von variierenden Vorfaktoren erfolgen. Die verbleibenden Ableitungen sind durch die Wahl einer angepassten Notation in einem gemeinsamen Differentiationsprozess standardisierbar. Außerdem werden zur Vereinfachung für die nachfolgenden Ausführungen die Iterationsindizes (m) und $(m+1)$ sowie Angaben von offensichtlichen Evaluationspunkten bei den Funktionalmatrizen ausgeblendet.

Totale Ableitung $\mathbf{K}_{uu} := d\mathbf{G}_u/d\mathbf{U}$ In diesem ersten Paragraph soll die Funktionalmatrix der inkrementellen Bewegungsgleichungen nach den unbekannten Verschiebungen aufgestellt werden. Zuvor ist jedoch eine Fallunterscheidung vorzunehmen, da die effektiven Strukturgleichungen in Abhängigkeit des zum Einsatz kommenden Zeitdiskretisierungsverfahren variieren. Im Rahmen der Zeitdiskretisierung mittels

DIRK-Verfahren, siehe Abschnitt 5.2.2, resultiert aus der Bildung der Richtungsableitung von Gl. (5.132)₁ in Bezug auf die unbekannten Verschiebungen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ der Ausdruck

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q})[\Delta \mathbf{U}] &= \frac{1}{\Delta t_n^2 \bar{a}_{ii}} \mathbf{M} \Delta \mathbf{U} + D_{\mathbf{U}} \mathbf{g}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T)[\Delta \mathbf{U}] \\ \Rightarrow \mathbf{K}_{uu} &:= \frac{d\mathbf{G}_u}{d\mathbf{U}} = \frac{1}{\Delta t_n^2 \bar{a}_{ii}} \mathbf{M} + \frac{d\mathbf{g}_u}{d\mathbf{U}}. \end{aligned} \quad (5.230)$$

⁶⁶Im Rahmen der Zeitdiskretisierung mit einem DIRK-Verfahren symbolisieren die nicht durch einen temporalen Diskretisierungsindex markierten Funktionsargumente $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_Q}$, T Größen der i -ten Stufe, d. h. $\mathbf{U} := \mathbf{U}_{ni}$, $\Theta := \Theta_{ni}$, $\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_{ni}$ und $T := T_{ni}$. Mit Bezug des linearisierten Systems (5.225) zu den zeitdiskretisierten Gleichungen der Generalized- α Methode repräsentieren $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ Systemvektoren zum Zeitpunkt t_{n+1} , d. h. $\mathbf{U} := \mathbf{u}_{n+1}$, $\Theta := \Theta_{n+1}$ und $\mathbf{Q} := \mathbf{q}_{n+1}$.

Analog zu Abschnitt 5.2.2 markieren die nicht indexierten Funktionsargumente \mathbf{U} , Θ , \mathbf{Q} , T in Gl. (5.230) Größen der i -ten Stufe, d. h. $\mathbf{U} := \mathbf{U}_{ni}$, $\Theta := \Theta_{ni}$, $\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_{ni}$ und $T := T_{ni}$.

Generalized- α Methode, siehe Abschnitt 5.2.4, resultiert aus der Bildung der Richtungsableitung von Gl. (5.150) in Bezug auf die unbekannten Verschiebungen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ unter Anwendung der Kettenregel der Ausdruck

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q})[\Delta \mathbf{U}] &= \frac{\alpha_m}{\Delta t_n^2 \beta} \mathbf{M} \Delta \mathbf{U} \\ &+ \alpha_f D_{\mathbf{U}_{n+\alpha_f}} \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f})[\Delta \mathbf{U}_{n+\alpha_f}] \\ \Rightarrow \mathbf{K}_{uu} &:= \frac{d\mathbf{G}_u}{d\mathbf{U}} = \frac{\alpha_m}{\Delta t_n^2 \beta} \mathbf{M} + \alpha_f \frac{d\mathbf{g}_u}{d\mathbf{U}_{n+\alpha_f}}. \end{aligned} \quad (5.231)$$

Analog zu Abschnitt 5.2.4 markieren die nicht indexierten Funktionsargumente \mathbf{U} , Θ , \mathbf{Q} in Gl. (5.4) Systemvektoren zum Zeitpunkt t_{n+1} , d. h.

$$\mathbf{U} := \mathbf{u}_{n+1}, \quad \Theta := \Theta_{n+1} \quad \text{und} \quad \mathbf{Q} := \mathbf{q}_{n+1}. \quad (5.232)$$

Zur Vereinheitlichung bzw. Zusammenführung des weiteren Differentiationsprozesses in Bezug auf die DIRK-Verfahren soll trotz Mehrdeutigkeit mit den zuvor angegebenen Definitionen (5.232) der Kraftvektor $\mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f})$ zu

$$\mathbf{g}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T) := \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}), \quad (5.233)$$

mit

$$\mathbf{U} := \mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \quad \Theta := \Theta_{n+\alpha_f}, \quad \mathbf{Q} := \mathbf{Q}_{n+\alpha_f} \quad \text{und} \quad T := T_{n+\alpha_f}, \quad (5.234)$$

umdeklariert werden. Alle folgenden Ableitungen für die Generalized- α Methode basieren dann auf der in den Gl. (5.233) und (5.234) aktualisierten Notation.

Die additive Aufspaltung des Kraftvektors $\mathbf{g}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T)$ gemäß Gl. (5.76) in die inneren Kräfte $\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T)$ und die äußeren Kräfte $\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}, T)$ führt auf

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \mathbf{g}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T)[\Delta \mathbf{U}] &= D_{\mathbf{U}} \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T)[\Delta \mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}} \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}, T)[\Delta \mathbf{U}] \\ \Rightarrow \frac{d\mathbf{g}_u}{d\mathbf{U}} &= \frac{d\mathbf{f}_{\text{int}}}{d\mathbf{U}} - \frac{d\mathbf{f}_{\text{ext}}}{d\mathbf{U}}. \end{aligned} \quad (5.235)$$

Bezugnehmend auf eine konsistente Linearisierung des ersten Summanden mit Größen in der Momentankonfiguration, siehe auch Gl. (5.54), ergibt sich der elementbezogene Ausdruck

$$\frac{d\mathbf{f}_{\text{int}}}{d\mathbf{U}} = \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_u^e \mathbf{k}_{uu}^e \mathbf{z}_u^e, \quad \text{mit} \quad \mathbf{k}_{uu}^e := \mathbf{k}_{uuG}^e + \mathbf{k}_{uuC}^e. \quad (5.236)$$

Das mechanische Kontingent $\mathbf{k}_{uu}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_u^e}$ spaltet sich dabei in einen Anteil $\mathbf{k}_{uuG}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_u^e}$, welcher der geometrischen Nichtlinearität entspringt, dem sogenannten initialen Spannungsterm („initial stress term“) und in einen Anteil $\mathbf{k}_{uuC}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_u^e}$, welcher der materiellen bzw. physikalischen Nichtlinearität zugeordnet werden kann, auf. Die geometrische

Elementsteifigkeitsmatrix $\mathbf{k}_{\text{uu}G}^e$, die aus einem Linearisierungsschritt bei festgehaltenen Spannungen resultiert, ist definiert als

$$\mathbf{k}_{\text{uu}G}^e = \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \mathbf{B}_{\text{NL}}^{e(k)\text{T}} \mathbf{M}_{\mathbf{T}}^{e(k)} \mathbf{B}_{\text{NL}}^{e(k)} \det \mathbf{J}^{e(k)}, \quad (5.237)$$

mit den in Abschnitt B.3 in den Gl. (B.25) und (B.26) definierten Hilfsmatrizen $\mathbf{B}_{\text{NL}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{9 \times n_{\text{u}}^e}$ und $\mathbf{M}_{\mathbf{T}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{9 \times 9}$. Für den konstitutiven Anteil $\mathbf{k}_{\text{uu}C}^e$ gilt

$$\mathbf{k}_{\text{uu}C}^e = \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \mathbf{B}_{\text{u}}^{e(k)\text{T}} \mathbf{C}_{\mathbf{T}}^{e(k)} \mathbf{B}_{\text{u}}^{e(k)} \det \mathbf{J}^{e(k)}, \quad (5.238)$$

mit der räumlichen Version der Verzerrungs-Verschiebungsmatrix $\mathbf{B}_{\text{u}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{6 \times n_{\text{u}}^e}$. Der räumliche Tangentenoperator in Matrixgestalt $\mathbf{C}_{\mathbf{T}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$ resultiert aus der Vortransformation der materiellen Tangente $\tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$, d. h.

$$\mathbf{C}_{\mathbf{T}}^{e(k)} = \frac{1}{J^{e(k)}} \mathbf{F}_{23}^{e(k)} \tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^{e(k)} \mathbf{F}_{23}^{e(k)\text{T}}. \quad (5.239)$$

Den hierfür benötigten Push-Forward-Operator $\mathbf{F}_{23}^{e(k)}$ konkretisiert Gleichung (B.24). Die sogenannte konsistente Tangente in der Referenzkonfiguration $\tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^{e(k)}$ ist infolge der in der vorliegenden Monographie zugrunde liegenden Konstitutivmodellstruktur bei endlichen Deformationen, siehe Gl. (5.44) und (5.55), und des im Rahmen des Multilevel-Newton-Algorithmus angewendeten Satzes über implizite Funktionen definiert als

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^{e(k)} &:= \left. \frac{d\tilde{\Phi}^e}{d\mathbf{E}^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} = \left[\frac{\partial \tilde{\Phi}^e}{\partial \mathbf{E}^e} + \frac{\partial \tilde{\Phi}^{e(k)}}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\mathbf{E}^{e(k)}} \right] \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}}, \quad \text{mit} \\ \tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} &:= \{\mathbf{E}^{e(k)\text{T}}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)\text{T}}\}^{\text{T}}. \end{aligned} \quad (5.240)$$

Neben der Bestimmung der im jeweiligen globalen Newton-Schritt aktualisierten inneren Variablen $\mathbf{q}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{q}}}$ erfordert die Konstruktion des Ableitungsoperators (5.240) das Differential $d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}/d\mathbf{E}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{q}} \times 6}$, welches aus der impliziten Differentiation des lokalen zeitdiskretisierten Spannungsalgorithmus (5.221) folgt. Die Lösung des linearen Gleichungssystems (5.222) liefert $d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}/d\mathbf{E}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{q}} \times 6}$ und $d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}/d\Theta^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{q}}}$, wobei das erstere Resultat in die Berechnung von $\tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^{e(k)}$ einfließt. Darüber hinaus zieht die in der vorliegenden Arbeit ausgenutzte Voigt Notation für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor (5.35) und den Greenschen Verzerrungstensor (5.45) die in Gl. (B.27) visualisierte Komponentendarstellung für $\tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^{e(k)}$ nach sich. Im Rahmen der kinematisch linearen Theorie entfällt der geometrisch nichtlineare Anteil $\mathbf{k}_{\text{uu}G}^e$, sodass die Identität

$$\mathbf{k}_{\text{uu}}^e := \mathbf{k}_{\text{uu}C}^e = \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \mathbf{B}_{\text{u}}^{e(k)\text{T}} \mathbf{C}_{\mathbf{T}}^{e(k)} \mathbf{B}_{\text{u}}^{e(k)} \det \mathbf{J}^{e(k)} \quad (5.241)$$

vorliegt. Weiterhin verschwindet aufgrund der Angleichung zwischen Koordinaten der Referenz- und Momentankonfiguration eine Differenzierung zwischen den Tangentenoperatoren $\mathbf{C}_T^{e(k)}$ und $\tilde{\mathbf{C}}_T^{e(k)}$, d. h. $\mathbf{C}_T^{e(k)} \approx \tilde{\mathbf{C}}_T^{e(k)}$. Mit der im Bereich kleiner Deformationen gültigen Spannungsbeziehung (5.101) und dem in der Zeit diskretisierten Spannungsalgorithmus

$$\mathbf{L}^{e(k)}(\mathbf{E}_L^{e(k)}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)}) = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_q} \quad \rightsquigarrow \quad \mathbf{q}^{e(k)} = \hat{\mathbf{q}}^{e(k)}(\mathbf{E}_L^{e(k)}, \Theta^{e(k)}) \quad (5.242)$$

ist die konsistente Tangente definiert als

$$\mathbf{C}_T^{e(k)} := \left. \frac{d\mathbf{h}^e}{d\mathbf{E}_L^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{h}^e}{\partial \mathbf{E}_L^e} + \frac{\partial \mathbf{h}^{e(k)}}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\mathbf{E}_L^{e(k)}} \right] \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}}, \quad \text{mit} \quad (5.243)$$

$$\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\mathbf{E}_L^{e(k)T}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)T}\}^T.$$

Die Linearisierung des externen Lastvektors $\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}, T) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, dem zweiten Summanden in Gl. (5.235), mündet in der Identität

$$\frac{d\mathbf{f}_{\text{ext}}}{d\mathbf{U}} = \frac{d\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}}{d\mathbf{U}}. \quad (5.244)$$

Die additiv in $\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}, T) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, siehe Definition (5.65), integrierten Volumenkräfte $\mathbf{f}_{\text{ext}\mathcal{B}}(T) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, welche gemäß der Berechnungsvorschrift (5.66) lediglich eine explizite Zeitabhängigkeit aufweisen, haben keinen Beitrag zur globalen Ableitung (5.244). Nur der aus der zeit- und deformationsabhängigen räumlichen Spannungsrandbedingung $\mathbf{t} = \mathbf{f}_s(\mathbf{x}^h, t) \in \mathbb{R}^3$ resultierende Lastvektor $\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}(\mathbf{U}, T) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, siehe Definition (5.68), findet in Gl. (5.244) Berücksichtigung. Unter Einbeziehen der zusätzlich zur volumetrischen Gebietszerlegung eingeführten FEM-Oberflächendiskretisierung des Neumann-Randes γ_s^h resultiert

$$\frac{d\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}}{d\mathbf{U}} = \sum_{e=1}^{\hat{n}_s^e} \mathbf{Z}_{\text{us}}^{eT} \mathbf{k}_{\text{uu}|s}^e \mathbf{Z}_{\text{us}}^e, \quad (5.245)$$

mit der elementbezogenen Laststeifigkeitsmatrix

$$\mathbf{k}_{\text{uu}|s}^e = \sum_{k=1}^{n_{\text{GPs}}^e} w_k \mathbf{N}_{\text{us}}^{e(k)T} \left[\left[\frac{d\mathbf{t}^e}{d\hat{\mathbf{u}}^e} \right] \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \det \mathbf{j}_s^{e(k)} + \left[\mathbf{t}^e \left\{ \frac{d}{d\hat{\mathbf{u}}^e} \det \mathbf{j}_s^e \right\} \right] \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \right] \mathbf{N}_{\text{us}}^{e(k)}, \quad (5.246)$$

$$\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\hat{\mathbf{u}}^{e(k)T}, T\}^T, \quad \det \mathbf{j}_s^{e(k)} = \|\boldsymbol{\chi}_{ts,\xi}^e(\boldsymbol{\xi}_k) \times \boldsymbol{\chi}_{ts,\eta}^e(\boldsymbol{\xi}_k)\|, \quad \hat{\mathbf{u}}^{e(k)} = \mathbf{N}_{\text{us}}^{e(k)} \mathbf{u}^e.$$

Zur Eingrenzung der verschiedenen Möglichkeiten für die Modellierung der Spannungsrandbedingungen $\mathbf{t}^e \in \mathbb{R}^3$ sollen in der vorliegenden Monographie ausschließlich die in zahlreichen wissenschaftlichen Veröffentlichungen anzutreffenden richtungsabhängigen Drucklasten

$$\mathbf{t}^e(\boldsymbol{\xi}, t) := -P^e(\mathbf{X}^h, t) \mathbf{n}^e(\hat{\mathbf{u}}^e(\boldsymbol{\xi}, t)), \quad \text{mit} \quad \mathbf{X}^h = \boldsymbol{\chi}_{\text{Rs}}^e(\boldsymbol{\xi}), \quad (5.247)$$

aus der Familie der sogenannten „follower loads“, betrachtet werden. Die stets normal zur deformierten Oberfläche γ_s^h ausgerichteten dynamischen Randbedingungen (5.247)

berechnen sich aus einem Produkt zwischen einer verschiebungsunabhängigen, jedoch als explizite Funktion der Zeit t und des Orts in der Referenzkonfiguration $\mathbf{X}^h \in \mathbb{R}^3$ modellierten Lastamplitude $\|\mathbf{t}^e\| = -P^e(\mathbf{X}^h, t)$ und einem deformationsabhängigen Normaleneinheitsvektor in der Momentankonfiguration

$$\mathbf{n}^e = \{\mathbf{x}_{,\xi}^h \times \mathbf{x}_{,\eta}^h\} / \|\mathbf{x}_{,\xi}^h \times \mathbf{x}_{,\eta}^h\| \in \mathbb{R}^3, \quad (5.248)$$

mit den Tangentenvektoren

$$\mathbf{x}_{,\xi}^h(\boldsymbol{\xi}) := \boldsymbol{\chi}_{ts,\xi}^e(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}_{ts}^e(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi} \in \mathbb{R}^3 \quad \text{und} \quad \mathbf{x}_{,\eta}^h(\boldsymbol{\xi}) := \boldsymbol{\chi}_{ts,\eta}^e(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}_{ts}^e(\boldsymbol{\xi})}{\partial \eta} \in \mathbb{R}^3 \quad (5.249)$$

sowie der Koordinatentransformation $\mathbf{x}^h = \boldsymbol{\chi}_{ts}^e(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\chi}_{Rs}^e(\boldsymbol{\xi}) + \hat{\mathbf{u}}^e(\boldsymbol{\xi}, t)$. Die partiellen Ableitungen (5.249) der isoparametrischen Koordinatentransformation (5.71)₂ eines Oberflächenelements e , $e = 1, \dots, \hat{n}_s^e$, nach den konvektiven Koordinaten des zweidimensionalen Referenzelements $\boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta\}^T \in \mathbb{R}^2$ bilden eine eindeutige tangential Basis, die es gestattet einen zugehörigen nach außen gerichteten, orthogonalen Normalenvektor $\mathbf{n}^e \in \mathbb{R}^3$ an dem Punkt $\boldsymbol{\chi}_{ts}^e(\boldsymbol{\xi})$ zu konstruieren. Infolge der verwendeten Vorzeichenkonvention für P^e kennzeichnet ein positiver Wert $P^e > 0$ eine Flächenpressung und eine negative Lastamplitude $P^e < 0$ den inversen Fall einer Zugbeanspruchung entlang \mathbf{n}^e . Für umfangreiche wissenschaftliche Diskussionen zur algorithmischen Behandlung von deformationsabhängigen Drucklasten im Rahmen der Finite-Elemente-Methode sei auf [Schweizerhof und Ramm, 1984; Simo et al., 1991; Yosibash et al., 2007; Wriggers, 2008] verwiesen. Vom aktuellen Deformationszustand abhängige Spannungsrandbedingungen mit tangentialen Komponenten liegen außerhalb des Betrachtungsumfangs. Nach Einbau der spezifizierten Cauchyschen Randbedingungen (5.247) in den zum Zeitpunkt T ausgewerteten oberflächenverteilten globalen Lastvektor (5.68) ergibt sich

$$\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}(\mathbf{U}, T) \approx - \sum_{e=1}^{\hat{n}_s^e} \mathbf{z}_{\text{us}}^{eT} \sum_{k=1}^{n_{\text{GPs}}^e} w_k P^{e(k)}(T) \mathbf{N}_{\text{us}}^{e(k)T} \mathbf{n}^{e(k)} \det \mathbf{j}_s^{e(k)}, \quad (5.250)$$

mit $P^{e(k)}(T) = P^e(\boldsymbol{\chi}_{Rs}^e(\boldsymbol{\xi}_k), T)$. Zum Aufstellen der aus der diskretisierten Version (5.250) resultierenden Laststeifigkeitsmatrix $d\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}/d\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\text{uu}}}$ wird zunächst die Richtungsableitung des deformationsabhängigen Produkts

$$\mathbf{a}^{e(k)} := \mathbf{n}^{e(k)} \det \mathbf{j}_s^{e(k)} = \mathbf{x}_{,\xi}^h(\boldsymbol{\xi}_k) \times \mathbf{x}_{,\eta}^h(\boldsymbol{\xi}_k), \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\xi}_k = \{\xi_k, \eta_k\}^T \in \mathbb{R}^2, \quad (5.251)$$

welches dem am Gauß-Punkt (k) , $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, ausgewerteten infinitesimalen Flächenvektor der Momentankonfiguration entspricht, gebildet. Dies führt auf

$$\mathbf{D}_{\mathbf{u}^e} \mathbf{a}^{e(k)}(\hat{\mathbf{u}}^{e(k)})[\Delta \mathbf{u}^e] = \left[\mathbf{W}_{\xi}^{e(k)} \mathbf{N}_{\text{us},\eta}^{e(k)} - \mathbf{W}_{\eta}^{e(k)} \mathbf{N}_{\text{us},\xi}^{e(k)} \right] \Delta \mathbf{u}^e. \quad (5.252)$$

Im Zuge des Linearisierungsprozesses von Gl. (5.251) wird das Kreuzprodukt in Anlehnung an Puso und Laursen [2004a] und Wriggers [2008] als lineare Abbildung von schiefsymmetrischen Matrizen $\mathbf{W}_{\xi}^{e(k)} := \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{x}_{,\xi}^h(\boldsymbol{\xi}_k)) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und $\mathbf{W}_{\eta}^{e(k)} := \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{x}_{,\eta}^h(\boldsymbol{\xi}_k)) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, sodass die Konvention

$$\mathbf{a}^{e(k)} := \mathbf{x}_{,\xi}^h(\boldsymbol{\xi}_k) \times \mathbf{x}_{,\eta}^h(\boldsymbol{\xi}_k) = \mathbf{W}_{\xi}^{e(k)} \mathbf{x}_{,\eta}^h(\boldsymbol{\xi}_k) = -\mathbf{W}_{\eta}^{e(k)} \mathbf{x}_{,\xi}^h(\boldsymbol{\xi}_k)$$

gilt, umgeschrieben. Der Matrixoperator $\mathbf{\Omega}(\mathbf{w})$ ist in Abschnitt A.1 eingehend erläutert. In Bezug auf die richtungsabhängigen Drucklasten (5.247) besitzt damit die elementbezogene Laststeifigkeitsmatrix die Gestalt

$$\mathbf{k}_{\text{uu}|s}^e = \sum_{k=1}^{n_{\text{GPs}}^e} w_k P^{e(k)}(T) \mathbf{N}_{\text{us}}^{e(k)T} \left[\mathbf{W}_{\xi}^{e(k)} \mathbf{N}_{\text{us},\eta}^{e(k)} - \mathbf{W}_{\eta}^{e(k)} \mathbf{N}_{\text{us},\xi}^{e(k)} \right] \in \mathbb{R}^{n_{\text{us}}^e \times n_{\text{us}}^e}, \quad (5.253)$$

wobei analog zu Gl. (5.249) die Matrizen $\mathbf{N}_{\text{us},\xi}^e(\boldsymbol{\xi}) = \partial \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\boldsymbol{\xi}) / \partial \xi \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{us}}^e}$ und $\mathbf{N}_{\text{us},\eta}^e(\boldsymbol{\xi}) = \partial \mathbf{N}_{\text{us}}^e(\boldsymbol{\xi}) / \partial \eta \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{us}}^e}$ partielle Ableitungen der Ansatzfunktionsmatrix eines Oberflächenelementes $\mathbf{N}_{\text{us}}^e(\boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{us}}^e}$ nach den natürlichen Elementkoordinaten $\boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta\}^T \in \mathbb{R}^2$ kennzeichnen. Die Assemblierung der einzelnen Elementbeiträge (5.253) gemäß Gl. (5.245) liefert schließlich die geforderte globale Funktionalmatrix $d\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}} / d\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\text{uu}}}$. Es ist leicht einzusehen, dass sich die durch $\mathbf{W}_{\xi}^{e(k)}$ und $\mathbf{W}_{\eta}^{e(k)}$ induzierte Antisymmetrie auch auf die Elementsteifigkeitsmatrix (5.253) überträgt. Dieses auf eine einzelne Oberflächenfacette bezogene Resultat manifestiert sich zudem im Allgemeinen in einem nicht symmetrischen globalen Funktionaloperator, siehe auch [Hibbit, 1979]. Wie Schweizerhof und Ramm [1984] detailliert zeigen, kann deformationsabhängigen Drucklasten nur in ausgewählten Spezialfällen, die z. B. den realisierbaren Deformationszustand der Struktur durch Verschiebungsrandbedingungen substanziell eingrenzen, eine Potentialfunktion zugeordnet werden. Auch eine in Gl. (5.247) postulierte körperbezogene Druckverteilung $P^e(\mathbf{X}^h, t)$, welche zum Zeitpunkt t von einer homogenen Verteilung in der Referenzkonfiguration abweicht, schließt das Auffinden eines zugehörigen Potentials von vornherein aus. Liegt allerdings ein pfadunabhängiges konservatives System vor, zeichnen sich sämtliche elementbezogene sowie globale Funktionalmatrizen durch Symmetrie aus.

Im Bereich kleiner Deformationen erscheint für viele Ingenieursanwendungen der Einsatz sogenannter „toter Lasten“, bei denen die Richtungs- und Amplitudenabhängigkeit der dynamischen Spannungsrandbedingungen von der Deformation unberücksichtigt bleibt, ausreichend zu sein. Ausgehend von der Approximation $\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}(t) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ impliziert diese Modellannahme ein Verschwinden sämtlicher Ableitungsterme, d. h.

$$\frac{d\mathbf{f}_{\text{ext}\delta\mathcal{B}}}{d\mathbf{U}} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\mathbf{f}_{\text{ext}}}{d\mathbf{U}} = \mathbf{0}. \quad (5.254)$$

Totale Ableitung $\mathbf{K}_{\mathbf{u}\Theta} := d\mathbf{G}_{\mathbf{u}} / d\Theta$ Bei Betrachtung eines voll gekoppelten thermomechanischen Problems hängt die schwache Form der Impulsbilanz (4.33) ebenfalls vom Temperaturfeld ab. Der Kopplungseffekt rührt zumeist aus thermisch induzierten Verzerrungen, die den Spannungszustand beeinflussen, oder aus Wirkungen des thermischen Feldes, die sich in Änderungen der mechanischen Eigenschaften, wie z. B. von Materialeigenschaften, manifestieren. Aus dieser angezeigten Abhängigkeit resultiert die Funktionalmatrix $\mathbf{K}_{\mathbf{u}\Theta} := d\mathbf{G}_{\mathbf{u}} / d\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\Theta\mathbf{u}}}$. Geschuldet der Problemkonstellation, dass die externen Kräfte unabhängig vom Temperaturfeld modelliert werden, liefert lediglich die Ableitung des inneren Kraftvektors $\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ nach den unbekannten Knotentemperaturen $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta\mathbf{u}}}$ einen Beitrag zur Linearisierung. Damit ergibt sich für

ein DIRK-Verfahren der Ausdruck

$$\begin{aligned} D_{\Theta} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q})[\Delta\Theta] &= \nu_L D_{\Theta} \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q}, T)[\Delta\Theta] \\ \Rightarrow \mathbf{K}_{u\Theta} &:= \frac{d\mathbf{G}_u}{d\Theta} = \frac{d\mathbf{f}_{\text{int}}}{d\Theta} \end{aligned} \quad (5.255)$$

bzw. für die Generalized- α Methode der an einem generalisierten Mittelpunkt ausgewertete Zusammenhang

$$\begin{aligned} D_{\Theta} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}, \Theta, \mathbf{Q})[\Delta\Theta] &= \nu_L D_{\mathbf{U}_{n+\alpha_f}} \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f})[\Delta\Theta_{n+\alpha_f}] \\ \Rightarrow \mathbf{K}_{u\Theta} &:= \frac{d\mathbf{G}_u}{d\Theta_{n+\alpha_f}} = \frac{d\mathbf{f}_{\text{int}}}{d\Theta_{n+\alpha_f}}. \end{aligned} \quad (5.256)$$

Wie im vorherigen Paragraphen erfolgt neben dieser Fallunterscheidung in Bezug auf den zum Einsatz kommenden Zeitintegrator auch eine heterogene Festlegung des konstanten Vorfaktors ν_L . Im Rahmen der Zeitdiskretisierung mittels eines DIRK-Verfahrens nimmt ν_L den Wert $\nu_L = 1$ und für eine Zeitintegration mit der Generalized- α Methode den Parameterwert $\nu_L = \alpha_f$ an. Um den weiteren Differentiationsprozess zu vereinheitlichen, wird der Kraftvektor $\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Theta_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f})$ aus Gl. (5.256) durch einen identisch zu Gl. (5.233) vollzogenen Variablenwechsel, siehe auch Gl. (5.234), umdeklariert. Die Ableitung der zeitdiskretisierten inneren Kräfte, siehe Definition (5.54), nach den unbekannten Knotentemperaturen $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}}$ führt dann auf

$$\frac{d\mathbf{f}_{\text{int}}}{d\Theta} = \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_u^e \mathbf{k}_{u\Theta}^e \mathbf{Z}_{\Theta}^e. \quad (5.257)$$

Das Herunterbrechen des Linearisierungsprozesses (5.257) auf elementbezogene Untermatrizen

$$\mathbf{k}_{u\Theta}^e = \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \mathbf{B}_u^{e(k)\text{T}} \mathbf{C}_{\Theta}^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)\text{T}} \det \mathbf{J}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{\Theta}^e}, \quad e = 1, \dots, n^e, \quad (5.258)$$

gelingt formal mittels der Koinzidenzmatrizen $\mathbf{Z}_u^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{uu}}$ und $\mathbf{Z}_{\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e \times n_{\Theta u}}$. Wegen der Affinität zwischen der konsistenten Linearisierung des Spannungszustands nach dem Temperaturfeld, d. h. $\tilde{\mathbf{C}}_{\Theta}^e := d\tilde{\Phi}^e / d\Theta^e \in \mathbb{R}^6$, und dem materiellen Tangentenoperator (5.240) gilt

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{C}}_{\Theta}^{e(k)} &:= \left. \frac{d\tilde{\Phi}^e}{d\Theta^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} = \left[\frac{\partial \tilde{\Phi}^e}{\partial \Theta^e} + \frac{\partial \tilde{\Phi}^{e(k)}}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\Theta^{e(k)}} \right] \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}}, \quad \text{mit} \\ \tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} &:= \{\mathbf{E}^{e(k)\text{T}}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)\text{T}}\}^{\text{T}}, \end{aligned} \quad (5.259)$$

wobei die zugehörige räumliche Größe $\mathbf{C}_{\Theta}^{e(k)} \in \mathbb{R}^6$ in Gl. (5.258) aus der Vortransformation

$$\mathbf{C}_{\Theta}^{e(k)} = \frac{1}{J^{e(k)}} \mathbf{F}_{23}^{e(k)} \tilde{\mathbf{C}}_{\Theta}^{e(k)} \quad (5.260)$$

hervorgeht. Die zur Konstruktion der thermischen Tangente $\mathbf{C}_\Theta^{e(k)}$ benötigte Ableitung $d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}/d\Theta^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q}$ ist neben $d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}/d\mathbf{E}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q \times 6}$ die Ausbeute des lokal durchgeführten konsistenten Linearisierungsschritts (5.222), also die Lösung dieses linearen Gleichungssystems.

Im Rahmen der kinematisch linearen Theorie vereinfacht sich die Elementsteifigkeitsmatrix mit den gemischten Ableitungen $\mathbf{k}_{u\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_\Theta^e}$ zu

$$\mathbf{k}_{u\Theta}^e = \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \mathbf{B}_u^{e(k)T} \mathbf{C}_\Theta^{e(k)} \mathbf{N}_\Theta^{e(k)T} \det \mathbf{J}^{e(k)}. \quad (5.261)$$

Weiterhin induziert die geometrische Vereinheitlichung in Kombination mit der Spannungsbeziehung (5.101) die konsistente Tangente

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_\Theta^{e(k)} &:= \left. \frac{d\mathbf{h}^e}{d\Theta^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{h}^e}{\partial \Theta^e} + \frac{\partial \mathbf{h}^{e(k)}}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\Theta^{e(k)}} \right] \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}}, \quad \text{mit} \\ \tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} &:= \{\mathbf{E}_L^{e(k)T}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)T}\}^T. \end{aligned} \quad (5.262)$$

Nachdem sämtliche Ableitungen des nichtlinearen algebraischen mechanischen Anteils $\mathbf{G}_u \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ betrachtet wurden, adressieren die nachfolgenden zwei Paragraphen die Funktionaloperatoren der raum- und zeitdiskretisierten Wärmeleitungsgleichung $\mathbf{G}_\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$.

Totale Ableitung $\mathbf{K}_{\Theta\Theta} := d\mathbf{G}_\Theta/d\Theta$ Die Linearisierung des nichtlinearen algebraischen thermischen Gleichungsanteils $\mathbf{G}_\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ nach den unbekannten Knotentemperaturen $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ resultiert in der globalen Funktionalmatrix $\mathbf{K}_{\Theta\Theta} := d\mathbf{G}_\Theta/d\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}}$. Analog zu den vorhergehenden Paragraphen wird eine elementbezogene Darstellung gewählt, die für $\mathbf{K}_{\Theta\Theta}$ zu der Zerlegung

$$\mathbf{K}_{\Theta\Theta} := \frac{d\mathbf{G}_\Theta}{d\Theta} = \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_\Theta^{eT} [\mathbf{k}_{\Theta\Theta|c_p}^e + \mathbf{k}_{\Theta\Theta|\kappa}^e - \mathbf{k}_{\Theta\Theta|r_\Theta}^e] \mathbf{Z}_\Theta^e - \sum_{e=1}^{\hat{n}_\Theta^e} \mathbf{Z}_{\Theta q}^{eT} \mathbf{k}_{\Theta\Theta|\Theta q}^e \mathbf{Z}_{\Theta q}^e \quad (5.263)$$

führt. Die Bezeichnungen bzw. Indexierungen der thermischen Elementsteifigkeitsmatrizen $\mathbf{k}_{\Theta\Theta|c_p}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_\Theta^e}$, $\mathbf{k}_{\Theta\Theta|\kappa}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_\Theta^e}$, $\mathbf{k}_{\Theta\Theta|r_\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_\Theta^e}$ und $\mathbf{k}_{\Theta\Theta|\Theta q}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_{\Theta q}^e}$ leiten sich von den indexierten Variationsanteilen aus Gl. (5.77) ab, sodass eine eindeutige Zuordnung der Linearisierungsressourcen vorliegt.

Das Bilden der Funktionalmatrix des mit der Wärmekapazität verknüpften Terms (5.79) manifestiert sich auf Elementebene in dem Ausdruck

$$\mathbf{k}_{\Theta\Theta|c_p}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \varrho_R^{e(k)} \left(\nu_{\Delta t_n} c_p^{e(k)} + \frac{\partial c_p^e}{\partial \hat{\Theta}^e} \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \dot{\hat{\Theta}}^{e(k)} \right) \mathbf{N}_\Theta^{e(k)} \mathbf{N}_\Theta^{e(k)T} \det \mathbf{J}^{e(k)}, \quad (5.264)$$

mit $\varrho_R^{e(k)} = \varrho_R(\mathbf{X}^{e(k)})$, $\mathbf{X}^{e(k)} = \chi_R^e(\xi_k)$, $c_p^{e(k)} = c_p^e(J^{e(k)}, \hat{\Theta}^{e(k)})$ und $\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\hat{\Theta}^{e(k)}, J^{e(k)}\}^T$. Es ist an dieser Stelle hervorzuheben, dass die von den Lösungsvektoren abhängigen lokalen Größen am Gauß-Punkt (k) , $k = 1, \dots, n_{GP}^e$, des Elements e , $e = 1, \dots, n^e$, wie z. B. $\hat{\mathbf{u}}^{e(k)} = \mathbf{N}_u^{e(k)} \mathbf{u}^e$, mit $\mathbf{u}^e = \mathbf{Z}_u^e \mathbf{U} + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \bar{\mathbf{u}}(T)$, $\hat{\Theta}^{e(k)} = \mathbf{N}_\Theta^{e(k)T} \Theta^e$, mit $\Theta^e = \mathbf{Z}_\Theta^e \Theta + \bar{\mathbf{Z}}_\Theta^e \bar{\Theta}(T)$,

$\mathbf{q}^{e(k)} = \mathbf{Z}_q^{e(k)} \mathbf{Q}$, $\mathbf{E}^{e(k)} = \tilde{\mathbf{B}}_u^{e(k)} \mathbf{u}^e$ sowie $J^{e(k)}$, sich aus einer auf die globalen Variablen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ und $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ angewendeten räumlichen Filter- oder Interpolationsoperation, siehe Abschnitt 5.1, bestimmen lassen. Die konstanten Vorfaktoren $\nu_{\Delta t_n}$ und ν_L in Gl. (5.264) variieren in Abhängigkeit des eingesetzten Zeitintegrators (DIRK-Verfahren oder Generalized- α Methode (Gen- α)) und sind durch die zugehörigen Verfahrensvorschriften der Zeitintegrationsverfahren als

$$\nu_{\Delta t_n} = \begin{cases} 1/\Delta t_n a_{ii} & (\text{DIRK}) \\ 1/\Delta t_\alpha & (\text{Gen-}\alpha), \quad \text{mit } \Delta t_\alpha = \alpha_f \gamma \Delta t_n / \alpha_m, \end{cases} \quad (5.265)$$

$$\nu_L = \begin{cases} 1 & (\text{DIRK}) \\ \alpha_f & (\text{Gen-}\alpha) \end{cases} \quad (5.266)$$

definiert. Der von eins abweichende Wert für den der Generalized- α Methode zugeordneten Multiplikator ν_L liegt in der Anwendung der Kettenregel begründet, die in dem multiplikativen Verschachteln mit $d\mathbf{U}_{n+\alpha_f}/d\mathbf{u}_{n+1} = \alpha_f \mathbf{I}_{n_{uu}}$ bzw. $d\Theta_{n+\alpha_f}/d\Theta_{n+1} = \alpha_f \mathbf{I}_{n_{\Theta u}}$ endet. Wie in den zwei vorausgegangenen Paragraphen werden im Rahmen der Zeitdiskretisierung mit der Generalized- α Methode zur Vereinheitlichung des Differentiationsprozesses nahezu alle zum Aufstellen der thermischen Elementsteifigkeitsmatrizen benötigten Funktionen, deren Ableitungen sowie die räumlich interpolierten Feldgrößen $\hat{\mathbf{u}}^{e(k)}$, $\hat{\Theta}^{e(k)}$, $\mathbf{q}^{e(k)}$ und deren räumlichen Ableitungen, wie z. B. $\mathbf{E}^{e(k)}$, $J^{e(k)}$, $\text{grad } \hat{\Theta}^{e(k)}$, an den umdeklarierten Variablen

$$\mathbf{U} := \mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \quad \dot{\mathbf{U}} := \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \quad \Theta := \Theta_{n+\alpha_f}, \quad \mathbf{Q} := \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, \quad T := T_{n+\alpha_f} \quad (5.267)$$

ausgewertet. Eine Ausnahme bildet allerdings die am Integrationspunkt (k) , $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, interpolierte Temperaturgeschwindigkeit $\dot{\Theta}^{e(k)} = \mathbf{N}_\Theta^{e(k)T} \dot{\Theta}^e$. Der elementbezogene thermische Freiheitsgradvektor $\dot{\Theta}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e}$ ist gemäß den zugrunde liegenden Verfahrensvorschriften in Abschnitt 5.2.2 für DIRK-Verfahren (DIRK) bzw. in Abschnitt 5.2.4 für die Generalized- α Methode (Gen- α) wie folgt definiert:

$$\dot{\Theta}^e = \mathbf{Z}_\Theta^e \dot{\Theta}_{ni} + \bar{\mathbf{Z}}_\Theta^e \dot{\Theta}(T_{ni}), \quad \text{mit } \dot{\Theta}_{ni} = \frac{\Theta_{ni} - \Theta_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} \quad (\text{DIRK}), \quad (5.268)$$

$$\dot{\Theta}^e = \mathbf{Z}_\Theta^e \dot{\Theta}_{n+\alpha_m} + \bar{\mathbf{Z}}_\Theta^e \dot{\Theta}(T_{n+\alpha_m}), \quad \text{mit } \dot{\Theta}_{n+\alpha_m} = \frac{\Theta_{n+\alpha_f} - \Theta_{n+\alpha_f}^S}{\Delta t_\alpha} \quad (\text{Gen-}\alpha) \quad (5.269)$$

Die globalen Temperaturgeschwindigkeiten $\dot{\Theta}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ bzw. $\dot{\Theta}_{n+\alpha_m} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ werden dabei als ein gewichteter Differenzenquotient von unbekannten Knotentemperaturen $\Theta_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ bzw. $\Theta_{n+\alpha_f} = \alpha_f \Theta_{n+1} + (1 - \alpha_f) \Theta_n \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ und einem Startvektor $\Theta_{ni}^S \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ bzw. $\Theta_{n+\alpha_f}^S \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ ausgedrückt. Aus der Ableitung der Beziehung (5.268)₂ nach der Primärvariablen $\Theta_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, d. h. $d\dot{\Theta}_{ni}/d\Theta_{ni} = 1/(\Delta t_n a_{ii}) \mathbf{I}_{n_{\Theta u}}$, bzw. aus der Ableitung der Beziehung (5.269)₂ nach der Primärvariablen $\Theta_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, d. h. $d\dot{\Theta}_{n+\alpha_m}/d\Theta_{n+\alpha_m} = 1/\Delta t_\alpha \mathbf{I}_{n_{\Theta u}}$, resultieren die in Gl. (5.265) angegebenen differierenden Werte für den Vorfaktor $\nu_{\Delta t_n}$.

Die Linearisierung des durch die vertikale Linienmethode diskretisierten Anteils $\mathbf{p}_\kappa(\mathbf{U}, \Theta, T) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, siehe Gl. (5.87), welcher dem Fourierschen Wärmeleitungsmodell aus Gl. (2.179) zugeordnet werden kann, führt auf die Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{k}_{\Theta\Theta|\kappa}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \left[\frac{\partial \kappa^e}{\partial \hat{\Theta}^e} \Big|_{\hat{\Theta}^{e(k)}} \mathbf{B}_{\Theta}^{e(k)T} \boldsymbol{\gamma}_{\Theta}^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)T} + \kappa^{e(k)} \mathbf{B}_{\Theta}^{e(k)T} \mathbf{B}_{\Theta}^{e(k)} \right] \det \mathbf{J}^{e(k)}, \quad (5.270)$$

mit $\kappa^{e(k)} = \kappa^e(\hat{\Theta}^{e(k)})$ und dem am Integrationspunkt (k) , $k = 1, \dots, n_{GP}^e$, berechneten Temperaturgradient $\boldsymbol{\gamma}_{\Theta}^{e(k)} := \text{grad } \hat{\Theta}^{e(k)} = \mathbf{B}_{\Theta}^{e(k)} \boldsymbol{\Theta}^e$. Für eine detailliertere Herleitung sei auf die Arbeiten von Quint [2012], Hamkar [2013] und Netz [2013] referiert.

Für den Fall eines im Konstitutivmodell verankerten Produktionsterms (2.184), der mit dem globalen Spaltenvektor $\mathbf{p}_{r_{\Theta}}(\mathbf{U}, \dot{\mathbf{U}}, \Theta, \dot{\Theta}, \mathbf{Q}, \dot{\mathbf{Q}}, T) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ gemäß Definition (5.91) korrespondiert, muss ein weiterer Funktionalmatrixanteil zu $\mathbf{K}_{\Theta\Theta} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}}$ hinzugefügt werden. Im Rahmen des auf ein Element heruntergebrochenen Linearisierungsprozesses gilt

$$\mathbf{k}_{\Theta\Theta|r_{\Theta}}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \varrho_R^{e(k)} c_{r_{\Theta}}^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)T} \det \mathbf{J}^{e(k)}, \quad (5.271)$$

mit dem skalaren Tangentenoperator

$$c_{r_{\Theta}}^{e(k)} = \left(\frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \hat{\Theta}^e} \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} + \nu_{\Delta t_n} \frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \dot{\hat{\Theta}}^e} \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} \right) + \left\{ \frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} + \nu_{\Delta t_n} \frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \dot{\mathbf{q}}^{e(k)}} \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} \right\}^T \left\{ \frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\hat{\Theta}^{e(k)}} \right\} \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} \quad (5.272)$$

und

$$\hat{\mathbf{y}}^{e(k)T} := \{\mathbf{E}^{e(k)T}, \dot{\mathbf{E}}^{e(k)T}, \hat{\Theta}^{e(k)}, \dot{\hat{\Theta}}^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)T}, \dot{\mathbf{q}}^{e(k)T}\} \text{ sowie } \hat{\mathbf{y}}^{e(k)T} := \{\mathbf{E}^{e(k)T}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)T}\}.$$

Damit die multiplikative Verknüpfung zwischen den geschweiften Klammern in Gl. (5.272) ein konformes Skalarprodukt auswertet, soll in der vorliegenden Arbeit die Konvention zur Anwendung kommen, dass Ableitungen einer skalaren Funktion nach einer vektorwertigen Größe als Spaltenvektoren eingeführt werden. Infolgedessen repräsentieren die Ableitungen des Produktionsterms p_{Θ}^e nach $\mathbf{q}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q}$ bzw. $\dot{\mathbf{q}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q}$ die Spaltenvektoren $\partial p_{\Theta}^e / \partial \mathbf{q}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q}$ und $\partial p_{\Theta}^e / \partial \dot{\mathbf{q}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q}$. Im Rahmen der durchgehend in Kap. 5 angewendeten Matrix-Vektor-Notation entspricht somit die zwischen den transponierten Größen $\{\partial p_{\Theta}^e / \partial \mathbf{q}^{e(k)}\}^T$, $\{\partial p_{\Theta}^e / \partial \dot{\mathbf{q}}^{e(k)}\}^T$ und dem aus dem konsistenten Linearisierungsschritt (5.222) hervorgehenden Differential $d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)} / d\hat{\Theta}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q}$ durchgeführte Operation einem Skalarprodukt. Zur Approximation der Raten genügt ein einfacher gewichteter Differenzenquotient, da die inneren Variablen $\mathbf{q}^{e(k)} = \mathbf{Z}_q^{e(k)} \mathbf{Q}$, $\mathbf{q}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_q}$, mit $\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_{ni}$ (DIRK) oder $\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}$ (Gen- α), sämtlicher in dieser Monographie behandelten inelastischen Materialmodellen in Bezug auf die Referenzkonfiguration definiert sind. In

Übereinstimmung mit den bereits in den Abschnitten 5.2.2 und 5.2.4 vorgestellten Verfahrensvorschriften der Zeitintegratoren ergibt sich

$$\dot{\mathbf{q}}^{e(k)} = \mathbf{Z}_q^{e(k)} \dot{\mathbf{Q}}_{ni}, \quad \text{mit} \quad \dot{\mathbf{Q}}_{ni} = \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{Q}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} \quad (\text{DIRK}), \quad (5.273)$$

$$\dot{\mathbf{q}}^{e(k)} = \mathbf{Z}_q^{e(k)} \dot{\mathbf{Q}}_{n+\alpha_m}, \quad \text{mit} \quad \dot{\mathbf{Q}}_{n+\alpha_m} = \frac{\mathbf{Q}_{n+\alpha_f} - \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}^S}{\Delta t_\alpha} \quad (\text{Gen-}\alpha). \quad (5.274)$$

Obwohl der Greensche Verzerrungsvektor $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^6$ und deren Rate $\dot{\mathbf{E}} \in \mathbb{R}^6$ aus einem kontinuumsmechanischen Blickwinkel heraus ein beobachter-indifferentes Verhalten aufweisen, das die materielle Objektivität der Konstitutivgleichungen a priori sichert, bleibt diese charakteristische Eigenschaft der punktuell präzierten Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\mathbf{E}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^6$, welche aus der einfachen Zeitableitung von Gl. (5.45) sowie aus der hieran anknüpfenden Substitution der Geschwindigkeitsapproximationen (5.131)₄ bzw. (5.143)₂ hervorgeht, nicht erhalten. Einen einfachen Lösungsansatz zur Konstruktion einer inkrementell objektiven Verzerrungsgeschwindigkeit aus dem zugehörigen auf der Referenzkonfiguration operierendem Verzerrungsmaß schlägt Simo und Hughes [1998, S. 276–288] vor. Adaptiert auf die in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden DIRK-Verfahren und die Generalized- α Methode nimmt dieser Vorschlag die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}^{e(k)} &:= \dot{\mathbf{E}}_{ni}^{e(k)} = \frac{\mathbf{E}_{ni}^{e(k)} - \mathbf{E}_{ni}^{e(k)S}}{\Delta t_n a_{ii}} \quad (\text{DIRK}), \quad \text{mit} \quad (5.275) \\ \mathbf{E}_{ni}^{e(k)} &= \left[\tilde{\mathbf{B}}_u^e \Big|_{\dot{\mathbf{u}}_{ni}^{e(k)}} \right] \mathbf{u}_{ni}^e, \quad \mathbf{u}_{ni}^e = \mathbf{Z}_u^e \mathbf{U}_{ni} + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \bar{\mathbf{u}}(T_{ni}), \\ \mathbf{E}_{ni}^{e(k)S} &= \left[\tilde{\mathbf{B}}_u^e \Big|_{\dot{\mathbf{u}}_{ni}^{e(k)}} \right] \mathbf{u}_{ni}^{eS}, \quad \mathbf{u}_{ni}^{eS} = \mathbf{Z}_u^e \mathbf{U}_{ni}^S + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \bar{\mathbf{u}}(T_{ni-1}), \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}^{e(k)} &:= \dot{\mathbf{E}}_{n+\alpha_f}^{e(k)} = \frac{\mathbf{E}_{n+\alpha_f}^{e(k)} - \mathbf{E}_n^{e(k)}}{\Delta t_n \alpha_f} \quad (\text{Gen-}\alpha), \quad \text{mit} \quad (5.276) \\ \mathbf{E}_{n+\alpha_f}^{e(k)} &= \left[\tilde{\mathbf{B}}_u^e \Big|_{\dot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}^{e(k)}} \right] \mathbf{u}_{n+\alpha_f}^e, \quad \mathbf{u}_{n+\alpha_f}^e = \mathbf{Z}_u^e \mathbf{U}_{n+\alpha_f} + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \bar{\mathbf{u}}(T_{n+\alpha_f}), \\ \mathbf{E}_n^{e(k)} &= \left[\tilde{\mathbf{B}}_u^e \Big|_{\dot{\mathbf{u}}_{n+\alpha_f}^{e(k)}} \right] \mathbf{u}_n^e, \quad \mathbf{u}_n^e = \mathbf{Z}_u^e \mathbf{u}_n + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \bar{\mathbf{u}}(t_n) \end{aligned}$$

Der letzte Summand in Gl. (5.263) beschreibt die konsistente Linearisierung der äußeren thermischen Energiezufuhr nach den unbekannten Knotentemperaturen $\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}}$ und ist mit dem thermischen Lastvektor $\mathbf{p}_{\Theta q}(\mathbf{U}, \Theta, T) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}}$, siehe Gl. (5.93), aus der diskreten Wärmeleitungsgleichung (5.98) verbunden. Das Aufstellen der zugehörigen thermischen Laststeifigkeitsmatrix $\mathbf{k}_{\Theta q}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta q}^e \times n_{\Theta q}^e}$ erfolgt dabei nahezu analog zur Behandlung der Oberflächenspannungen, wobei auch hier die Modellierung der mit dem Wärmefluss assoziierten skalaren Funktionen f_q^e und $f_{\Theta q}^e$ eingeschränkt werden soll. Die nachfolgenden Ausführungen basieren auf körperbezogenen Ansätzen der Form

$$f_q^e(\mathbf{x}^h, t) := \tilde{f}_q^e(\mathbf{X}^h, t) \quad \text{und} \quad f_{\Theta q}^e(\mathbf{x}^h, \hat{\Theta}^e, t) := \tilde{f}_{\Theta q}^e(\mathbf{X}^h, \hat{\Theta}^e, t), \quad (5.277)$$

welche die im Elementgebiet deklarierten thermischen Lasten als explizite Funktion der Zeit t und des Orts in der Referenzkonfiguration $\mathbf{X}^h = \chi_R^e(\boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{R}^3$ sowie die gemischten Randbedingungen (5.277)₂ als Funktion des Temperaturfeldes $\hat{\Theta}^e = \mathbf{N}_\Theta^{eT} \boldsymbol{\Theta}^e$ modellieren. Alternativ ist ein raumbezogener Ansatz, siehe z. B. [Schweizerhof und Ramm, 1984], realisierbar. Hiervon wird allerdings Abstand genommen, da solch eine Vorgehensweise eine erheblich komplexere Linearisierungsprozedur nach sich zieht. Unter Berücksichtigung der zusätzlich zur volumetrischen Gebietszerlegung eingeführten konformen FEM-Oberflächendiskretisierung des kombinierten thermischen Neumann-Randes $\gamma_q^h \cup \gamma_{\Theta q}^h$ resultiert

$$\mathbf{k}_{\Theta\Theta|\Theta q}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}q}^e} w_k \left. \frac{\partial \tilde{f}_{\Theta q}^e}{\partial \hat{\Theta}^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \mathbf{N}_{\Theta q}^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta q}^{e(k)T} \det \mathbf{j}_s^{e(k)}, \quad (5.278)$$

mit $\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\mathbf{X}^{e(k)T}, \hat{\Theta}^{e(k)}, T\}^T$.

Im Rahmen der kinematisch linearen Theorie ergeben sich für die elementbezogenen Funktionalmatrizen (5.264), (5.270), (5.271) und (5.278) einige Vereinfachungen, die in der nachfolgenden Aufzählung kurz erläutert werden sollen.

- Der Übergang von großen zu kleinen Deformationen impliziert an die Wärmekapazitätsfunktion eine Anpassung der Modellierung in Form von $c_p^e(\varepsilon_{L_v}^e, \hat{\Theta}^e)$, mit der im Element interpolierten Volumendehnung $\varepsilon_{L_v}^e := \text{tr } \mathbf{E}_L^e = \mathbf{e}^T \mathbf{B}_u^e \mathbf{u}^e$. Die Definition der in Voigt Notation aufgestellten Einheitsmatrix $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^6$ kann Gl. (5.281) entnommen werden. Nach vollzogener Adaptierung der Argumente für c_p^e gilt der Ausdruck (5.264) auch im Rahmen der kinematisch linearen Theorie.
- Erneut müssen lediglich die Deformationsabhängigkeiten in der Materialfunktion des Produktionsterms durch den geometrisch linearisierten Verzerrungsvektor $\mathbf{E}_L^e \in \mathbb{R}^6$ ausgetauscht werden, sodass in Bezug auf Gl. (5.271) die allgemeine Modellannahme (5.103)₂ wirksam ist. Für die geometrisch linearisierte Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\mathbf{E}}_L^e \in \mathbb{R}^6$ gilt außerdem die Beziehung

$$\dot{\mathbf{E}}_L^{e(k)} = \tilde{\mathbf{B}}_u^{e(k)} \dot{\mathbf{u}}^e, \quad \text{mit} \quad \dot{\mathbf{u}}^e = \mathbf{Z}_u^e \dot{\mathbf{U}} + \bar{\mathbf{Z}}_u^e \dot{\mathbf{u}}(T). \quad (5.279)$$

Totale Ableitung $\mathbf{K}_{\Theta u} := d\mathbf{G}_\Theta/d\mathbf{U}$ Bezugnehmend auf die Aussagen und Annahmen aus dem vorhergehenden Paragraphen erfolgt abschließend die konsistente Linearisierung des nichtlinearen algebraischen thermischen Gleichungsanteils $\mathbf{G}_\Theta \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$ hinsichtlich der unbekannten Knotenverschiebungen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ nach einem identischen Schema. Die elementbezogene Darstellung für $\mathbf{K}_{\Theta u} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{uu}}$ lautet

$$\mathbf{K}_{\Theta u} := \frac{d\mathbf{G}_\Theta}{d\mathbf{U}} = \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{Z}_\Theta^{eT} [\mathbf{k}_{\Theta u|c_p}^e + \mathbf{k}_{\Theta u|\kappa}^e - \mathbf{k}_{\Theta u|r_\Theta}^e] \mathbf{Z}_u^e - \sum_{e=1}^{\hat{n}_\Theta} \mathbf{Z}_{\Theta q}^{eT} \mathbf{k}_{\Theta u|q}^e \mathbf{Z}_{us}^e. \quad (5.280)$$

Die erste Teilmatrix $\mathbf{k}_{\Theta u|c_p}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_u^e}$ korreliert mit der Deformationsabhängigkeit der Wärmekapazität $c_p^e(\hat{\Theta}^{e(k)}, J^{e(k)})$, ausgedrückt durch die Determinante des Deformationsgradienten $J^{e(k)} := \det \mathbf{F}^{e(k)}$, und nimmt unter Berücksichtigung der Richtungsableitung

$$\mathbf{D}_{u^e} J^{e(k)}(\hat{\mathbf{u}}^{e(k)})[\Delta \mathbf{u}^e] = J^{e(k)} \mathbf{e}^T \mathbf{B}_u^{e(k)} \Delta \mathbf{u}^e, \quad \text{mit} \quad \mathbf{e} = \{1, 1, 1, 0, 0, 0\}^T \in \mathbb{R}^6, \quad (5.281)$$

die Form

$$\mathbf{k}_{\Theta|c_p}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \varrho_R^{e(k)} J^{e(k)} \left. \frac{\partial c_p^e}{\partial J^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \dot{\Theta}^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)} \mathbf{e}^T \mathbf{B}_u^{e(k)} \det \mathbf{J}^{e(k)} \quad (5.282)$$

an. Die Auswertung der skalaren Temperaturableitung $\partial c_p^e / \partial \hat{\Theta}^e$ finden an der Stelle $\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{J^{e(k)}, \hat{\Theta}^{e(k)}\}^T$ statt.

Bei der Linearisierung des diskretisierten Spaltenvektors $\mathbf{p}_{\kappa}(\mathbf{U}, \Theta, T) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, siehe Definition (5.87), nach der Bewegung verschmelzen die Konstitutivannahme des Fourschen Wärmeleitungsmodells (2.179) und die nichtlineare Kinematikbeschreibung miteinander. Dies führt auf den lokalen Ausdruck

$$\mathbf{k}_{\Theta|\kappa}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \kappa^{e(k)} \left[\mathbf{B}_{\Theta}^{e(k)T} \boldsymbol{\gamma}_{\Theta}^{e(k)} \mathbf{e}^T - 2\mathbf{M}_{NL}^{e(k)} \right] \mathbf{B}_u^{e(k)} \det \mathbf{J}^{e(k)}, \quad (5.283)$$

wobei die in Gl. (B.41) definierte Matrix $\mathbf{M}_{NL}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e \times 6}$ die geometrische Nichtlinearität des thermischen Gradientenoperators $\mathbf{B}_{\Theta}^{e(k)} \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\Theta}^e}$, siehe Gl. (5.85), in der elementbezogenen Tangentenmatrix (5.283) abbildet. Für weitere Details zur Herleitung von Gl. (5.283) sei auf den Anhang B.3 verwiesen.

Der letzte, mit der Volumendiskretisierung verknüpfte Summand in Gl. (5.280), kennzeichnet den Tangentenanteil, der aus der konsistenten Linearisierung des Produktionsterms (2.184) entsteht. Heruntergebrochen auf Elementebene besitzt dieser die Gestalt

$$\mathbf{k}_{\Theta|r_{\Theta}}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{GP}^e} w_k \varrho_R^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)} \mathbf{C}_{r_{\Theta}}^{e(k)T} \mathbf{B}_u^{e(k)} \det \mathbf{J}^{e(k)}. \quad (5.284)$$

Die vortransformierte Tangente

$$\mathbf{C}_{r_{\Theta}}^{e(k)} = \mathbf{F}_{23}^{e(k)} \tilde{\mathbf{C}}_{r_{\Theta}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^6 \quad (5.285)$$

geht dabei aus dem auf der Referenzkonfiguration operierenden Tangentenoperator

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{C}}_{r_{\Theta}}^{e(k)} := & \left\{ \left. \frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \mathbf{E}^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} + \hat{\nu}_{\Delta t_n} \left. \frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \dot{\mathbf{E}}^e} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \right\} \\ & + \left[\frac{d\hat{\mathbf{q}}^{e(k)}}{d\mathbf{E}^{e(k)}} \right]^T \bigg|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \left\{ \left. \frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \mathbf{q}^{e(k)}} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} + \nu_{\Delta t_n} \left. \frac{\partial p_{\Theta}^e}{\partial \dot{\mathbf{q}}^{e(k)}} \right|_{\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)}} \right\} \in \mathbb{R}^6, \end{aligned} \quad (5.286)$$

mit $\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\mathbf{E}^{e(k)T}, \dot{\mathbf{E}}^{e(k)T}, \hat{\Theta}^{e(k)}, \dot{\hat{\Theta}}^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)T} \dot{\mathbf{q}}^{e(k)T}\}^T$ und $\hat{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\mathbf{E}^{e(k)T}, \Theta^{e(k)}, \mathbf{q}^{e(k)T}\}^T$ hervor. Mit Blick auf die Approximationsvorschriften (5.275) und (5.276) für die inkrementell objektive Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\mathbf{E}}^{e(k)} \in \mathbb{R}^6$ ist der konstante Vorfaktor $\hat{\nu}_{\Delta t_n}$ definiert als

$$\hat{\nu}_{\Delta t_n} = \begin{cases} 1/\Delta t_n a_{ii} & (\text{DIRK}) \\ 1/\Delta t_n \alpha_f & (\text{Gen-}\alpha). \end{cases} \quad (5.287)$$

Aufgrund der gewählten körperbezogenen Darstellung (5.277) für die thermischen Randbedingungsfunktionen f_q^e und $f_{\Theta_q}^e$ sind diese nicht von der Bewegung abhängig. Die einzige Deformationsabhängigkeit des thermischen Lastvektors $\mathbf{p}_{\Theta_q}(\mathbf{U}, \boldsymbol{\Theta}, T) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_u}}$, welcher den äußeren thermischen Energietransfer charakterisiert, rührt aus einer in der Momentankonfiguration ausgeführten Oberflächenintegration. Für das Aufstellen von $\mathbf{k}_{\Theta_u|q}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q} \times n_{us}^e}$ muss demnach die Auswirkung eines veränderlichen Flächenelements $d\gamma^e = \det \mathbf{j}_s^e d\xi d\eta$, mit $\det \mathbf{j}_s^e(\boldsymbol{\xi}) = \|\boldsymbol{\chi}_{ts,\xi}^e(\boldsymbol{\xi}) \times \boldsymbol{\chi}_{ts,\eta}^e(\boldsymbol{\xi})\|$, $\mathbf{j}_s^{e(k)} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$, betrachtet werden. Das Bilden der Richtungsableitung für die punktuell ausgewertete Determinante der Jacobi-Matrix führt auf

$$D_{\mathbf{u}^e} \det \mathbf{j}_s^{e(k)}(\hat{\mathbf{u}}^{e(k)})[\Delta \mathbf{u}^e] = \overbrace{\left\{ \frac{\boldsymbol{\chi}_{ts,\xi}^e(\boldsymbol{\xi}_k) \times \boldsymbol{\chi}_{ts,\eta}^e(\boldsymbol{\xi}_k)}{\|\boldsymbol{\chi}_{ts,\xi}^e(\boldsymbol{\xi}_k) \times \boldsymbol{\chi}_{ts,\eta}^e(\boldsymbol{\xi}_k)\|} \right\}^T}^{\mathbf{n}^{e(k)T}} \left[\mathbf{W}_{\xi}^{e(k)} \mathbf{N}_{us,\eta}^{e(k)} - \mathbf{W}_{\eta}^{e(k)} \mathbf{N}_{us,\xi}^{e(k)} \right] \Delta \mathbf{u}^e,$$

wobei die schiefsymmetrischen Matrizen $\mathbf{W}_{\xi}^{e(k)} := \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\chi}_{ts,\xi}^e(\boldsymbol{\xi}_k)) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und $\mathbf{W}_{\eta}^{e(k)} := \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\chi}_{ts,\eta}^e(\boldsymbol{\xi}_k)) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ sowie der Normaleneinheitsvektor $\mathbf{n}^{e(k)} \in \mathbb{R}^3$ bereits bei der Linearisierung des externen Lastvektors $\mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}, T) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ eingeführt wurden. Der Einbau dieses Zwischenergebnis in die Ableitung des elementbezogenen Wärmestromvektors

$$\mathbf{p}_{\Theta_q}^{e(k)}(\mathbf{u}^e, \boldsymbol{\Theta}^e, T) = w_k \left(f_q^e|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} + f_{\Theta_q}^e|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} \right) \mathbf{N}_{\Theta_q}^{e(k)} \mathbf{j}_s^{e(k)} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta_q}^e}$$

in Bezug auf die Verschiebungsfreiheitsgrade eines Oberflächenelementes $\mathbf{u}^e \in \mathbb{R}^{n_{us}^e}$ liefert schließlich

$$\mathbf{k}_{\Theta_u|q}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{\text{GPq}}^e} w_k \left(f_q^e|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} + f_{\Theta_q}^e|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} \right) \mathbf{N}_{\Theta_q}^{e(k)} \mathbf{n}^{e(k)T} \left[\mathbf{W}_{\xi}^{e(k)} \mathbf{N}_{us,\eta}^{e(k)} - \mathbf{W}_{\eta}^{e(k)} \mathbf{N}_{us,\xi}^{e(k)} \right], \quad (5.288)$$

mit $\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\mathbf{X}^{e(k)T}, T\}^T$ und $\hat{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\mathbf{X}^{e(k)T}, \hat{\boldsymbol{\Theta}}^{e(k)}, T\}^T$.

Im Rahmen der kinematisch linearen Theorie ergeben sich für die elementbezogenen Tangentenmatrizen mit den gemischten Ableitungen, siehe Gl. (5.282) bis (5.284) und (5.288), einige Vereinfachungen, die in der nachfolgenden Aufzählung kurz erläutert werden sollen.

- Der Übergang von großen zu kleinen Deformationen impliziert an die Wärmekapazitätsfunktion eine Anpassung der Modellierung in Form von $c_p^e(\varepsilon_{Lv}^e, \hat{\boldsymbol{\Theta}}^e)$, siehe auch Gl. (5.103)₁, mit der im Element interpolierten Volumendehnung $\varepsilon_{Lv}^e := \text{tr} \mathbf{E}_L^e = \mathbf{e}^T \mathbf{B}_u^e \mathbf{u}^e$. Hierdurch resultiert für $\mathbf{k}_{\Theta_u|c_p}^e \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e \times n_u^e}$ der vereinfachte Ausdruck

$$\mathbf{k}_{\Theta_u|c_p}^e = \nu_L \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \varrho^{e(k)} \left. \frac{\partial c_p^e}{\partial \varepsilon_{Lv}^e} \right|_{\hat{\mathbf{y}}^{e(k)}} \dot{\boldsymbol{\Theta}}^{e(k)} \mathbf{N}_{\Theta}^{e(k)} \mathbf{e}^T \mathbf{B}_u^{e(k)} \det \mathbf{j}^{e(k)}, \quad (5.289)$$

mit $\tilde{\mathbf{y}}^{e(k)} := \{\varepsilon_{Lv}^e, \hat{\boldsymbol{\Theta}}^{e(k)}\}^T$.

- Der aus Linearisierung des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes hinsichtlich der Deformation hervorgehende Term (5.283) entfällt bei Betrachtung kleiner Deformationen, d. h. es gilt $\mathbf{k}_{\Theta|q}^e = \mathbf{0}_{n_{\Theta}^e \times n_u^e}$.
- Wie bereits im vorherigen Paragraph in Bezug auf die Linearisierung des mit dem Produktionsterm verknüpften algebraischen Gleichungsanteils angesprochen, erfolgt für die Materialfunktion p_{Θ}^e eine Anpassung der deformationsabhängigen Größen gemäß Gl. (5.103)₂. Weiterhin induziert die geometrische Vereinheitlichung den Übergang der Tangentenoperatoren $\mathbf{C}_{r_{\Theta}}^{e(k)} \approx \tilde{\mathbf{C}}_{r_{\Theta}}^{e(k)}$.
- Im Bereich kleiner Deformationen wirken die thermischen Randbedingungen stets auf die Oberfläche der Ausgangskonfiguration. Die Berücksichtigung einer Deformationsabhängigkeit für den thermischen Lastvektor ist daher nicht relevant. Infolgedessen entfällt wegen $\mathbf{k}_{\Theta|q}^e = \mathbf{0}_{n_{\Theta}^e \times n_{us}^e}$ ein entsprechender Term in Gl. (5.280).

5.5 Mortar-basierte Finite-Elemente-Methode zur numerischen Behandlung von Kontakt

Erste Beiträge zur Behandlung von Kontaktproblemen im Rahmen der Finite-Elemente-Methode gehen zurück auf Francavilla und Zienkiewicz [1975] und Hughes et al. [1976]. Die in diesen Veröffentlichungen sowie in den Arbeiten von Wriggers und Zavarise [1993] vorgestellten, knoten-basierten Ansätze, welche auch als NTN-Diskretisierung⁶⁷ bezeichnet werden, setzen eine facettierte Oberflächendiskretisierung der Kontaktflächen mit gegenüberliegenden Knoten, also eine konforme Vernetzung der Slave- und Master-Seite, sowie die Annahme kleiner Deformationen voraus. Die NTN-Kontaktdiskretisierung erzeugt die Interfacebedingungen durch eine paarweise Kopplung von je einem Slave-Knoten und einem Master-Knoten. Hierauf folgte als Weiterentwicklung eine weitere Kollokationsformulierung,⁶⁸ die erstmals gestattete Kontaktprobleme mit nicht-konformen Vernetzungen sowie geometrisch nichtlineare Kontaktinteraktionen unter Hinzunahme von großen Gleitbewegungen zu simulieren. Diese sogenannte NTS-Kontaktdiskretisierung⁶⁹ erzwingt in der klassischen Version punktweise die diskreten Kopplungsbedingungen zwischen einem FE-Knoten (Slave-Knoten) und dessen sich auf der gegenüberliegenden Kontaktfläche (Master-Seite) befindenden Projektionspunkt, der innerhalb eines zugeordneten finiten Elements (Master-Segment) lokalisierbar ist.⁷⁰ Wie beispielsweise Konyukhov und Schweizerhof [2008] und Zavarise und De Lorenzis [2009b] und Wriggers [2006, S. 60] zeigen, ist diese Projektion jedoch unter Umständen nicht eindeutig oder existiert nicht. Derartige Fälle, welche die Identifikation eines mit einem Slave-Knoten assoziierenden

⁶⁷Die Abkürzung NTN bedeutet „node-to-node“.

⁶⁸Kollokationsmethoden formulieren im Allgemeinen die Kontaktbedingungen direkt auf der Diskretisierungsebene und erfüllen diese punktweise.

⁶⁹Das Akronym NTS steht für „node-to-segment“ im zweidimensionalen Fall und für „node-to-surface“ im dreidimensionalen Fall.

⁷⁰Bei dem sogenannten „One-Pass“-NTS-Algorithmus dürfen die Kontaktknoten der Slave-Seite die Master-Segmente nicht durchdringen. Die Durchdringung der slave-seitigen Oberflächenelemente durch die auf der Master-Seite positionierten Knoten ist hingegen zulässig, siehe z. B. [Cichosz, 2012, S. 53].

Master-Segments blockieren, bedürfen einer Sonderbehandlung. Die ersten Formulierungen der NTS-Kontaktdiskretisierungstechnik finden sich beispielsweise in [Hughes et al., 1977; Hallquist, 1979]. Hierauf aufbauend wurden viele Erweiterungen und Verallgemeinerungen u. a. von Hallquist et al. [1985], Bathe und Chaudhary [1985], Wriggers und Simo [1985], Benson und Hallquist [1990], Laursen [1992], Simo und Laursen [1992], Laursen und Simo [1993a], Wriggers et al. [1990], Zavarise und De Lorenzis [2009a], Zavarise und De Lorenzis [2011] und Martins et al. [2017] vorgeschlagen. Für exemplarische Anwendungen der NTS-Diskretisierungsmethode sei auf [Zavarise et al., 1992; Wriggers, 1996; Zavarise et al., 1998; Laursen, 2003; Bandeira et al., 2004; Erhart et al., 2006; Wriggers, 2006; Khoei et al., 2009; Zavarise und De Lorenzis, 2009b; Hesch und Betsch, 2011b; Weißenfels, 2013; Franke, 2014] referiert. Obwohl in vielen kommerziellen FEM-Programmen wegen ihrer Einfachheit und hohen Robustheit häufig eingesetzt, hält der NTS-Algorithmus auch einige Nachteile bereit. Wie beispielsweise Taylor und Papadopoulos [1991], Crisfield [2000] und El-Abbasi und Bathe [2001] zeigen, erfüllt der klassische „Knoten-zu-Segment“-Ansatz bei inkompatiblen Oberflächenvernetzungen nicht den in den Abschnitten 6.3.2 und 6.3.3 dargestellten konservativen Kontakt-Patch-Test. Dies bedeutet, dass ein konstanter Spannungszustand in aufeinander gepressten Körpern nicht korrekt über das Kontakt-Interface übertragen werden kann. Eine modifizierte NTS-Kontaktformulierung, die den Verifikationstest besteht, stellen Zavarise und De Lorenzis [2009a] und Zavarise und De Lorenzis [2011] vor. Kontaktprobleme mit großen Deformationen gehen zumeist auch mit beachtlichen tangentialen Relativbewegungen zwischen den Körpern einher. Werden solche Fragestellungen mit dem NTS-Algorithmus untersucht, treten häufig numerische Instabilitäten in Gestalt des sogenannten Kontaktflatterns⁷¹ auf. Dieses unerwünschte Phänomen ist das Resultat einer groben räumlichen Geometrieapproximation der ursprünglich in der kontinuierlichen Betrachtung glatten Kontaktoberflächen, die zu Knicken zwischen benachbarten Elementen führt. Gleitet ein Slave-Knoten über solch einen Knick treten unphysikalische Sprünge in der Amplitude und Richtung der Kontaktkraft auf,⁷² welche auf die diskontinuierlichen Orientierungen der Normalen- und Tangentialvektoren der in der Falte aneinander grenzenden Master-Segmente zurückzuführen sind, siehe hierzu z. B. [Papadopoulos und Taylor, 1992; Zavarise und De Lorenzis, 2009a] sowie [Wriggers, 2006, S. 191].⁷³ Im Rahmen einer iterativen Lösungsprozedur wirkt sich dies negativ auf die Konvergenzcharakteristik aus. Ein ähnliches numerisches Problem entsteht, wenn ein slave-seitiger Kollokationspunkt über Berandungen der Master-Oberfläche hinweg gleitet. Zur Vermeidung dieser Instabilitäten wurden beispielsweise von Taylor und Wriggers [1999], Padmanabhan und Laursen [2001], Wriggers et al. [2001], Krstulovic-Opara et al. [2002], Stadler et al. [2003], Puso und Laursen [2002], Puso [2004] und Neto et al. [2017] Ansätze auf Basis diverser Interpolationsmethoden, wie z. B. Hermite-, Bézier-, Spline- und NURBS-Interpolationen,

⁷¹In der englischsprachigen Literatur wird hierfür der Begriff „contact chattering“ verwendet.

⁷²Dies führt zudem zu einer ungenauen Repräsentation der Spannungen im Kontakt-Interface.

⁷³Infolge der im Rahmen der Standard-Finite-Elemente-Methode durchgeführten C^0 -kontinuierlichen Geometrieapproximation sind die auf den facettierten Kontaktoberflächen errichteten Normalen- und Tangentialvektorfelder nur im Elementgebiet stetig. An den Kanten und Ecken erfahren sie eine diskontinuierliche Richtungsänderung, insbesondere wenn sehr starke Krümmungsänderungen bei den diskretisierten Oberflächen vorliegen.

für eine geglättete Oberflächenbeschreibung vorgeschlagen, siehe auch [Wriggers, 2006, S. 279–302]. Einen weiteren bedeutsamen Einflussfaktor, welcher sich stark auf die Ergebnisse der Simulation auswirken kann, nimmt die Entscheidung über die Zuweisung von Slave- und Master-Seite ein. Um diesem Selektionsbias zu beseitigen, wurden sogenannte „Two-Pass“-NTS-Algorithmen⁷⁴ entwickelt, die ein stetiges Vertauschen von Slave- und Master-Seite durchführen, siehe hierzu z. B. [Taylor und Papadopoulos, 1991; Crisfield, 2000]. Dies führt allerdings häufig auf ein diskretes überbestimmtes System, dass sich zu restriktiv bzw. zu steif verhält. In der Fachliteratur ist dann von sogenannten Verriegelungseffekten (Locking-Effekte) die Rede.⁷⁵ Wie außerdem [Laursen, 2003, S. 416] feststellt, kann für die NTS-Kontaktdiskretisierungstechnik, obwohl es sich bei ihr um eine konvergentes Schema handelt, eine optimale räumliche Konvergenzordnung, welche theoretisch für eine zugrunde liegende konforme Gebietsdiskretisierung (ohne Interface) zu erwarten ist, nicht aufrechterhalten werden.

Eine wesentliche Basis für die in der vorliegenden Arbeit vorgestellte Mortar-Methode nimmt der sogenannte STS-Ansatz⁷⁶ ein. Eine erste Realisierung dieses Algorithmus im Kontext einer Perturbed-Lagrangeschen Formulierung und zweidimensionalen bilinearen FE-Interpolationen wurde von Simo et al. [1985b] vorgestellt, siehe auch Abschnitt 4.5.4. Im Kontrast zur vorherigen NTS-Kontaktdiskretisierungsstrategie stützt sich der „Segment-zu-Segment“-Ansatz auf eine systematische Unterteilung der Kontaktflächen in individuelle Kontakt-Segmente, die als gemeinsame Überlappungsregion je eines Slave- und Master-Elements definiert sind. Diese aufwendigere Strategie erlaubt es, die integral formulierte Nichtdurchdringungsbedingung segmentweise entlang einer virtuellen Zwischenschicht des Kontakt-Segments ohne Unstetigkeiten in den Integranden auszuwerten. In Kombination mit segmentweise definierten konstanten Ansätzen für den Kontaktdruck und der Applikation einfacher Quadraturregeln, wie z. B. der Trapezregel, resultieren gemittelte Werte für die Abstandsfunktion eines Kontakt-Segments. Da ein derartiger gewichteter Klaffungswert mehr Informationen als eine mittels des NTS-Algorithmus punktuell berechnete Größe einbezieht, erfolgt die Erzwingung der Übergangsbedingungen kontinuierlicher. Papadopoulos und Taylor [1992] setzen im Rahmen ihrer vorgestellten zweidimensionalen segment-basierten Kontaktdiskretisierungstechnik auf eine Penalty-Regularisierungsstrategie, auf ein C^0 -stetiges Normalenvektorfeld und auf biquadratische Elemente. Zur Auswertung der Segment-Integrale kommt eine zur gewählten Raumdiskretisierung konforme Quadratur in Form der Simpsonregel zum Einsatz. Eine entsprechende dreidimensionale Erweiterung mit trilinearen finiten Elementen präsentieren Papadopoulos und Taylor [1993]. Darüber hinaus sind mit Bezug zum STS-Ansatz, der sich u. a. durch Stabilität, Bestehen des Kontakt-Patch-Tests sowie Erhalten der optimalen, räumlichen Konvergenzrate in der Verzerrungsenergie bei Netzverfeinerung auszeichnet, weiterhin die Arbeiten von Zavarise und Wriggers [1998] und

⁷⁴Beim „Two-Pass“-NTS-Algorithmus dürfen weder die Slave-Knoten die Master-Segmente, noch die Master-Knoten die Slave-Facetten durchdringen.

⁷⁵Für weitere Details zu allgemeinen Locking-Phänomenen sei auf die Arbeit von Koschnick [2004] und der dort zitierten Literatur verwiesen.

⁷⁶Das Akronym STS steht für „segment-to-segment“. In der STS- bzw. NTS-Terminologie werden Slave- und Master-Elemente als Segmente bezeichnet, wodurch sich der Name „Segment-zu-Segment“-Diskretisierung ableitet.

El-Abbasi und Bathe [2001] zu nennen.

Die zuletzt aufgelisteten Eigenschaften der STS-Algorithmen stellen plausible, einzuhaltende Anforderungen einer jeden Kontaktdiskretisierungstechnik dar. Aus diesem Grund sind in den 1990er Jahren Bestrebungen unternommen worden, Interfacediskretisierungstechniken auf einer mathematisch fundierten Basis zu entwickeln. Im folgenden Abschnitt 5.5 soll eine den STS-Algorithmen ähnliche Kopplungsmethode mit variationell konsistent formulierten Kontaktbedingungen, die sogenannte Mortar-Methode, vorgestellt werden. Obwohl die Trennlinie zwischen den beiden zuletzt genannten Diskretisierungstechniken in der Literatur nicht strikt definiert ist, wird in der vorliegenden Monographie eine Kontaktformulierung als mortar-basiert bezeichnet, sofern die Approximation der Kontaktintegrale auf den mathematischen Überlegungen der Mortar-Methode beruhen. Die Mortar-Methode als Kopplungswerkzeug ist grundsätzlich so allgemein ausgelegt, dass Teilgebiete, die durch unterschiedliche numerische Diskretisierungsverfahren analysiert werden, entlang ihrer gemeinsamen, in der Regel nicht-konform diskretisierten Gebietsränder, miteinander gekoppelt werden können. In der vorliegenden Arbeit findet jedoch ausschließlich die Finite-Elemente-Methode als Ortsdiskretisierungsverfahren Anwendung, weshalb sich alle weiteren Ausführungen mit Bezug zur Mortar-Methode auf dieses Verfahren beschränken. Einzug in die wissenschaftlichen Diskussionen hat die Mortar-Methode ursprünglich als nicht-konforme Gebietszerlegungstechnik⁷⁷ durch Bernardi et al. [1993] und Bernardi et al. [1994] erhalten.⁷⁸ Das breite Anwendungsfeld resultiert aus deren charakteristischen Eigenschaften, zu denen neben Existenznachweisen von eindeutigen Lösungen für die Annahme kleiner Verformungen und linearer Elastizität, die Erfüllung des Kontakt-Patch-Tests sowie die Einhaltung der Ladyženskaja-Babuška-Brezzi-Stabilitätsbedingung zählen. Die zentrale Rolle bei der Gestaltung der Mortar-Methode nahm jedoch die Forderung nach der Konservierung der Optimalität für die approximierten Lösung ein. Gemäß dem von Strang und Fix [1973] aufdiktierten inf-sup-Konvergenzkriterium (LBB) für den Diskretisierungsfehler einer FE-Lösung im Raum⁷⁹, sollte die mortar-basierte Finite-Elemente-Methode in der Lage sein, die optimalen räumlichen Konvergenzraten in Bezug auf eine Netzverfeinerung, wie sie beispielsweise bei einem äquivalenten, ungeteilten Struktur- oder konformen Interfaceproblem zu erwarten sind, auch bei einer nicht-konformen Vernetzung der Schnittstelle zu bewahren. Einen anschaulichen Überblick zu den wesentlichen theoretischen Konstruktionsgrundsätzen, die in die Mortar-Methode Einzug gehalten haben, gibt [Laursen, 2003, S. 404–416]. Mit Bezug zur numerischen Kontaktmechanik finden sich im Rahmen einer kinematisch linearen Betrachtung erste ingenieursnahe Realisierungen der Mortar-Methode in [McDevitt und Laursen, 2000]. Die Erweiterung auf geometrisch nichtlineare Kontaktinteraktionen mit und ohne reibungsbehaftete Gleitbewegungen wird beispielsweise in [Cavalieri und Cardona, 2013a; Cavalieri und Cardona, 2013b], [Cichosz und Bischoff, 2011; Cichosz,

⁷⁷Im Kontext einer räumlichen Diskretisierungstechnik zur Behandlung von Interfacebedingungen ist die Mortar-Methode in den breiten Themenkomplex der in der englischsprachigen Literatur betitelten „Domain Decomposition“-Techniken einzuordnen.

⁷⁸Für ingenieursnahe Anwendungen von Gebietszerlegungsverfahren zur Kopplung von nicht-konformen Finite-Elemente-Diskretisierungen sei auf [Puso und Laursen, 2003; Hesch und Betsch, 2010; Hesch und Betsch, 2011a] verwiesen.

⁷⁹Für weitere Details hierzu sei auf [Strang und Fix, 1973; Hughes, 2000] verwiesen.

2012], [Farah et al., 2015; Farah et al., 2017] [Fischer und Wriggers, 2005; Fischer und Wriggers, 2006], [Franke, 2014], [Gitterle et al., 2010; Gitterle, 2012], [Hammer, 2012; Hammer, 2013], [Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann und Ramm, 2008], [Hesch und Betsch, 2009; Hesch und Betsch, 2011c], [Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Popp, 2012; Popp et al., 2012; Popp et al., 2013; Popp und Wall, 2014], [Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b], [Wiling und Bischoff, 2017] [Tur et al., 2009; Tur et al., 2012], [Yang et al., 2005; Yang und Laursen, 2007; Yang und Laursen, 2008], [Temizer, 2012; Temizer et al., 2012; Temizer, 2013] und [Weßenfels, 2012; Weßenfels und Wriggers, 2015] behandelt. Aufgrund der ausgedehnten aktiven Forschungsanstrengungen auf dem Gebiet der Mortar-Methode sind die vorausgegangen sowie die folgenden Literaturlisten keineswegs als vollständige Zusammenstellungen zu verstehen, sondern wurden vielmehr hinsichtlich der inspirierenden Wirkung auf die vorliegende Arbeit arrangiert.

Zur variationell konsistenten Behandlung der reibungsbehafteten Gleit- und Nichtdurchdringungsbedingungen haben sich seit den 1990er Jahren diverse mortar-basierte Kontaktformulierungen entwickelt. So wurden in den Anfangsjahren die Interface-Kopplungsbedingungen direkt in Lösungsräume der Primärvariablen integriert, sodass die Nebenbedingungen entlang des Kopplungsrandes a priori im integralen Sinne erfüllt sind, siehe hierzu die Arbeiten von Bernardi et al. [1993], Bernardi et al. [1994], Belgacem et al. [1998] und Bernardi et al. [2005].⁸⁰ Hierauf folgend wurden alternative Formulierungen populär, die anstatt Restriktionen an die Lösungsräume zur Umsetzung der schwach formulierten Kontaktbedingungen zu stellen, bekannte Methoden aus der Optimierungstheorie, wie z. B. die Lagrange-Multiplikator-, die Penalty- oder die Augmented-Lagrange-Methode, verwendeten, siehe auch Abschnitt 4.5. Aus der Verzweigung der unterschiedlichen Entwicklungsrichtungen innerhalb der Mortar-Methode sind in Bezug auf eine Penalty-Regularisierungsstrategie exemplarisch die Arbeiten von Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b], Yang et al. [2005], Fischer und Wriggers [2005], Fischer und Wriggers [2006] und Puso et al. [2008] zu nennen. Eine Regularisierung der Kontaktbedingungen mit Hilfe einer Augmented-Lagrange-Methode nehmen z. B. Cavaliere und Cardona [2013a] vor. Umgesetzt mit der weit verbreiteten Lagrange-Multiplikator-Methode, welche auf die Lösung eines Sattelpunktproblems führt, erfüllt eine mortar-basierte Kontaktdiskretisierung die integral formulierten Kontaktbedingungen exakt. Für die räumliche Interpolation der Lagrange-Multiplikatoren, die den im Interface auftretenden Kontaktspannungen entsprechen, kommen häufig die klassischen Ansatzfunktionen, die bereits bei der Approximation der Geometrie und der Feldvariablen in Abschnitt 5.1 Anwendung gefunden haben, zum Einsatz. Im Allgemeinen geht eine typische Sattelpunktformulierung mit zusätzlichen Unbekannten in Form der diskreten Lagrange-Multiplikatoren einher, die zu einer Aufblähung des konsistent linearisierten Gleichungssystems beitragen. Um dieses der Standard-Lagrange-Multiplikator-Methode anhaftende Defizit zu beseitigen, schlägt Wohlmuth [2000] für den diskreten Lagrange-Multiplikator-Lösungsraum eine alternative Wahl basierend auf dualen Formfunktionen vor, siehe auch [Wohlmuth, 2001]. Die sogenannte duale Lagrange-Multiplikator-Interpolation erlaubt es, die zusätzlichen diskreten Kopplungsvariablen durch eine einfache statische Kondensationsoperation aus

⁸⁰Bei der rein verschiebungsbezogenen Formulierung handelt es sich um eine nicht-konforme positiv definite Mortar-Methode.

dem zu lösenden linearisierten Gleichungssystem zu eliminieren. Die diskreten Knotenwerte der Lagrange-Multiplikator lassen sich dann in einer jeden globalen Newton-Iterationen anschließenden Nachlaufrechnung in Abhängigkeit der Knotenverschiebungen bestimmen. Außerdem ergeben sich, ohne Einfluss auf die Optimalität der Mortar-Methode zu nehmen, einfach zu realisierende, knotenweise entkoppelte Übergangsbedingungen. Anwendungen dieses Konzepts auf kinematisch lineare Kontaktprobleme finden sich in [Hüeber und Wohlmuth, 2005; Hüeber et al., 2005; Hüeber et al., 2008; Hüeber, 2008; Hüeber und Wohlmuth, 2009; Hüeber und Wohlmuth, 2012]. Die Erweiterung auf Kontaktprobleme mit großen Deformationen wurde von Hartmann [2007], Hartmann et al. [2007] und Hartmann und Ramm [2008] vorgestellt und beispielsweise in [Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Gitterle et al., 2010; Cichosz und Bischoff, 2011; Popp, 2012; Popp et al., 2012; Gitterle, 2012; Popp et al., 2013; Popp und Wall, 2014; Farah et al., 2015; Farah et al., 2017] um technische Details der Mortar-Segmentierung oder der konsistenten Linearisierung, rigoros weiterentwickelt. Die Anwendung der sogenannten Standard-Mortar-Methode mit klassischen Ansatzfunktionen ist exemplarisch in [Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Fischer und Wriggers, 2005; Puso et al., 2008; Tur et al., 2009; Hesch und Betsch, 2009; Hesch und Betsch, 2011c] dargestellt.

Neben der Wahl des Ansatzfunktionsraums für die Lagrange-Multiplikatoren liegt ein weiteres Hauptaugenmerk einer mortar-basierten Diskretisierungsstrategie auf der numerischen Auswertung der Kopplungsintegrale. Die Oberflächenkopplungen ergeben sich aus integralen Produkten von räumlich interpolierten Feldgrößen, wobei in die multiplikative Verknüpfung zwischen dem slave-seitig deklarierten Lagrange-Multiplikatorfeld und den master-seitig definierten Verschiebungsgrößen Informationen von beiden Kontaktflächen eingehen. Bezogen auf ein Slave- oder Master-Element sind dadurch die angesprochenen Integranden in den einzelnen Facettengebieten nicht glatt. Um die Quadratur solcher nicht stetig differenzierbarer Ausdrücke zu realisieren, haben sich prinzipiell zwei verschiedene Integrationstechniken in der Praxis etabliert. Kongruent zu der STS-Kontaktdiskretisierung von oben teilt die erste Version das Integrationsgebiet in geeignete Untergebiete, die in der vorliegenden Arbeit die Bezeichnung Mortar-Segmente zugewiesen bekommen, mit glatten Integranden auf. Bei Betrachtung von linearen Diskretisierungsansätzen repräsentiert dabei jedes Mortar-Segment den deformationsabhängigen Überlappungsbereich je eines Slave- und Master-Elements. Erfolgreiche Umsetzungen dieses segmentbasierten Quadraturkonzepts wurden beispielsweise in [Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Yang et al., 2005; Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann und Ramm, 2008; Hesch und Betsch, 2009; Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Gitterle et al., 2010; Cichosz und Bischoff, 2011; Hesch und Betsch, 2011c; Popp, 2012; Popp et al., 2012; Gitterle, 2012; Cavalieri und Cardona, 2013a; Popp et al., 2013; Popp und Wall, 2014; Farah et al., 2015] vorgenommen. Eine alternative Integrationstechnik, welche auf die Einführung von Mortar-Segmenten verzichtet und eine elementweise Integration auf der Slave-Seite vollführt, stellen Fischer und Wriggers [2005] vor. Um eine adäquate Genauigkeit in Bezug den auf Raumintegrationsfehler zu erzielen, ist jedoch eine entsprechend große Anzahl an Integrationspunkten erforderlich. Die Integralauswertung auf den unveränderlichen Facettengebieten wurde auch in [Fischer und Wriggers, 2006; Tur et al., 2009; Tur et al., 2012] angewendet. Für einen Vergleich beider Varianten ist es ratsam die Arbeit von Farah et al. [2015] zu konsultieren.

Als Kopplungswerkzeug der neuesten Generation zeichnet sich die mortar-basierte Finite-Elemente-Methode durch ausgezeichnete Stabilitäts- und Genauigkeitseigenschaften aus, wie sie bislang von keiner der oben aufgezählten Strategie erreicht wurden. Maßgeblich hieran ist die integrale Repräsentation der Kopplungsbedingungen für das Interface beteiligt. Das Hauptaugenmerk der nachfolgenden Unterabschnitte liegt aus diesem Grund auf einer anschaulichen und implementationsnahen Darstellung des in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden Mortar-Kontaktalgorithmus.

5.5.1 Raumdiskretisierung der virtuellen Kontaktarbeit und variationellen Kontaktbedingungen

Für die Raumdiskretisierung des in Kapitel 3 dargestellten dreidimensionalen Kontaktproblems im Rahmen finiter Deformationen werden gewöhnliche isoparametrische finite Elemente, siehe Abschnitt 5.1, verwendet, die den Lösungs- und Gewichtungsraum, $\mathcal{S}_{u,t}^{(i)}$ und $\mathcal{V}_u^{(i)}$, $i = 1, 2$, durch endlichdimensionale Näherungen, $\mathcal{S}_{u,t}^{h(i)}$ und $\mathcal{V}_u^{h(i)}$, ersetzen.⁸¹ Der Schwerpunkt dieses Abschnitts liegt auf der Raumdiskretisierung der Kopplungsanteile $\delta\pi_c^h$ und $\delta\pi_\lambda^h$ für die Kontaktschnittstelle, sodass im Folgenden lediglich die Geometrie-, Verschiebungs- und Lagrange-Multiplikatorinterpolationen auf dem facettierten Kontaktrand $\gamma_c^{h(i)}$, $i = 1, 2$, betrachtet werden. Aufgrund der offensichtlich vorliegenden Verflechtung zwischen zugehörigen diskretisierten Volumen- und Flächenregionen werden die FE-Ansätze im Gebiet $\omega^{h(i)}$ bzw. $\Omega^{h(i)}$ auf den entsprechenden Interfacierand $\gamma_c^{h(i)}$ bzw. $\Gamma_c^{h(i)}$ projiziert. Wie beispielsweise Abb. 5.1 zeigt, bedingt eine dreidimensionale FE-Vernetzung der Struktur mit 4-knotigen Tetraeder-Elementen (Tet4) 3-knotige Dreieck-Facetten (Tri3) an der Oberfläche.⁸² Für die Gebietszerlegung der Kontaktschnittstelle in $n_c^{e(1)}$ slave-seitige und $n_c^{e(2)}$ master-seitige finite Elemente ergibt sich⁸³

$$\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(1)}] \approx \Gamma_c^{h(1)} = \bigcup_{e=1}^{n_c^{e(1)}} \Gamma^{e(1)}, \quad \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}] \approx \gamma_c^{h(1)} = \bigcup_{e=1}^{n_c^{e(1)}} \gamma^{e(1)}, \quad (5.290)$$

$$\partial_c \mathcal{R} [\mathcal{B}^{(2)}] \approx \Gamma_c^{h(2)} = \bigcup_{e=1}^{n_c^{e(2)}} \Gamma^{e(2)}, \quad \partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(2)}] \approx \gamma_c^{h(2)} = \bigcup_{e=1}^{n_c^{e(2)}} \gamma^{e(2)}. \quad (5.291)$$

⁸¹Aufgrund der Beschränkung auf Kontaktinteraktionen zwischen zwei deformierbaren Körpern nimmt der hochgestellte Körperindex $(\cdot)^{(i)}$ zur Differenzierung der Interface-Seiten und deren zugeordneten physikalischen Größen die Werte $i = 1, 2$ an.

⁸²Der Begriff Facette wird in der vorliegenden Arbeit als Synonym für Element bzw. präziser für Oberflächenelement in Anspruch genommen.

⁸³Zur Bewahrung einer klassischen Nomenklatur soll im Folgenden $\Gamma_c^{h(1)}$ bzw. $\gamma_c^{h(1)}$ und $\Gamma_c^{h(2)}$ bzw. $\gamma_c^{h(2)}$ als Slave- und Master-Fläche bezeichnet werden. Es sei darauf hingewiesen, dass diese Terminologie nicht dieselbe Bedeutung zugesprochen bekommt wie bei traditionellen Kontaktdiskretisierungsstrategien, z. B. dem NTS-Algorithmus. Im Verlauf der Ausführungen zur Mortar-Methode werden die zu differenzierenden Kontaktoberflächen mit spezifischen Merkmalen ausgestattet, die nicht auf das klassische Slave-Master-Konzept übertragbar sind. In erster Linie jedoch soll die Einteilung in Slave- und Master-Seite als Unterscheidungskriterium dienen.

Darüber hinaus ist es sinnvoll, für die von den Volumenvernetzungen abgeleiteten Oberflächendiskretisierungen verschiedene disjunktive Untermengen von globalen Knoten einzuführen. Ausgehend von einer Raumdiskretisierung mit insgesamt $n^n = n^{n(1)} + n^{n(2)}$ Knoten wird von folgender bijektiven Aufteilung ausgegangen: Der globale Knotensatz $\mathcal{S} = \{1, 2, \dots, n_S^n\}$ beinhaltet alle n_S^n potentiellen Kontaktknoten der mit $n_c^{e(1)}$ finiten Elementen diskretisierten Slave-Oberfläche $\Gamma_c^{h(1)}$ bzw. $\gamma_c^{h(1)}$, die Untermenge $\mathcal{M} = \{1, 2, \dots, n_M^n\}$ umfasst alle n_M^n potentiellen Kontaktknoten der mit $n_c^{e(2)}$ finiten Elementen diskretisierten Master-Oberfläche $\Gamma_c^{h(2)}$ bzw. $\gamma_c^{h(2)}$ und die Untermenge $\mathcal{N} = \{1, 2, \dots, n_N^n\}$ enthält die verbleibenden $n_N^n = n^n - n_S^n - n_M^n$ diskreten Knotenpunkte.⁸⁴ Basierend auf dieser Organisation lassen sich der Gesamtvektor der Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_a^T = \{\mathbf{u}_a^{(1)T}, \mathbf{u}_a^{(2)T}\}$ und der Gesamtvektor der virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}_a^T = \{\delta \mathbf{u}_a^{(1)T}, \delta \mathbf{u}_a^{(2)T}\}$ in entsprechende Subvektoren $\hat{\mathbf{u}}_N \in \mathbb{R}^{n_{uaN}}$, $\mathbf{u}_S \in \mathbb{R}^{n_{uus}}$, $\mathbf{u}_M \in \mathbb{R}^{n_{uum}}$, $\delta \hat{\mathbf{u}}_N \in \mathbb{R}^{n_{uaN}}$, $\delta \mathbf{u}_S \in \mathbb{R}^{n_{uus}}$, $\delta \mathbf{u}_M \in \mathbb{R}^{n_{uum}}$ gemäß

$$\mathbf{u}_a^T(t) = \{\hat{\mathbf{u}}_N^T(t), \mathbf{u}_S^T(t), \mathbf{u}_M^T(t)\} \in \mathbb{R}^{n_{ua}} \quad \text{und} \quad \delta \mathbf{u}_a^T = \{\delta \hat{\mathbf{u}}_N^T, \delta \mathbf{u}_S^T, \delta \mathbf{u}_M^T\} \in \mathbb{R}^{n_{ua}}, \quad (5.292)$$

mit $n_{ua} = 3 \times n^n = n_{uaN} + n_{uus} + n_{uum}$, $n_{uaN} = 3 \times n_N^n$, $n_{uus} = 3 \times n_S^n$, $n_{uum} = 3 \times n_M^n$, partitionieren. Die bereits in Kapitel 3 geforderte Restriktion $\gamma_u^{h(i)} \cap \gamma_c^{h(i)} = \emptyset$, $i = 1, 2$, dass sich die Ränder $\gamma_u^{h(i)}$ und $\gamma_c^{h(i)}$ nicht überlappen, sowie die eindeutige Zuordnung jedes Knotens zu einer einzigen Untermenge⁸⁵ initiiert eine weitere Unterteilung von $\hat{\mathbf{u}}_N^T = \{\mathbf{u}_N^T, \bar{\mathbf{u}}_N^T\}$ in einen unbekannten und bekannten Anteil, $\mathbf{u}_N \in \mathbb{R}^{n_{uuN}}$ und $\bar{\mathbf{u}}_N \in \mathbb{R}^{n_{upN}}$, mit $n_{uaN} = n_{uuN} + n_{upN}$. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird die Annahme getroffen, dass die mit den diskretisierten Berandungen $\gamma_u^{h(1)}$ und $\gamma_u^{h(2)}$ verknüpften Freiheitsgrade für die Verschiebungsrandbedingungen vollständig in $\bar{\mathbf{u}}_N \in \mathbb{R}^{n_{upN}}$ enthalten sind, d. h. $\bar{\mathbf{u}}_N^T = \bar{\mathbf{u}}^T = \{\bar{\mathbf{u}}^{(1)T}, \bar{\mathbf{u}}^{(2)T}\}$. Eine identische Behandlung erfolgt für $\delta \hat{\mathbf{u}}_N^T = \{\delta \mathbf{u}_N^T, \delta \bar{\mathbf{u}}_N^T\}$, wobei der vorgegebene virtuelle Knotenverschiebungsvektor $\delta \bar{\mathbf{u}}_N$ verschwindet, d. h. $\delta \bar{\mathbf{u}}_N^T = \delta \bar{\mathbf{u}}^T = \{\delta \bar{\mathbf{u}}^{(1)T}, \delta \bar{\mathbf{u}}^{(2)T}\} = \mathbf{0}^T$. In Hinblick auf die Entwicklung der semidiskreten Gleichungsstruktur für das nichtlineare Kontaktproblem und dem Aufzeigen der Abhängigkeiten ist es zudem zweckmäßig, die unbekannten Knotenverschiebungen $\mathbf{u}^T = \{\mathbf{u}^{(1)T}, \mathbf{u}^{(2)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ unter Ausblendung von $\bar{\mathbf{u}}_N$ und die virtuellen Knotenverschiebungen $\delta \mathbf{u}^T = \{\delta \mathbf{u}^{(1)T}, \delta \mathbf{u}^{(2)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ in

$$\mathbf{u}^T(t) = \{\mathbf{u}_N^T(t), \mathbf{u}_S^T(t), \mathbf{u}_M^T(t)\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}} \quad \text{und} \quad \delta \mathbf{u}^T = \{\delta \mathbf{u}_N^T, \delta \mathbf{u}_S^T, \delta \mathbf{u}_M^T\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}} \quad (5.293)$$

zu zerlegen. Die Anzahl unbekannter Verschiebungsfreiheitsgrade ist damit durch $n_{uu} = n_{uu}^{(1)} + n_{uu}^{(2)} = n_{uuN} + n_{uus} + n_{uum}$ festgelegt.

Die im Sinne eines isoparametrischen Elementkonzepts für eine räumliche Darstellung⁸⁶

⁸⁴Die aufsteigend nummerierten Knotenmengen \mathcal{S} , \mathcal{M} und \mathcal{N} leiten sich aus der globalen Knotennummerierung der Gesamtstrukturen ab.

⁸⁵Es sei angemerkt, dass Überlappungen bzw. Zusammenstöße von Dirichlet- und Kontaktträgern in der vorliegenden Arbeit nicht betrachtet werden. Die zumeist hieraus resultierenden überbestimmten Gleichungsstrukturen erfordern eine spezielle numerische Behandlung. Ähnliche Probleme treten auf, wenn mehrere Kontaktgebiete auf einem materiellen Körper in identischen Punkten bzw. Linien zusammenstoßen. Für weitere Details sei auf [Wohlmuth, 2001; Puso und Laursen, 2003] referiert.

⁸⁶Die Ansätze (5.294) bis (5.297) können ebenfalls in Bezug auf $\Gamma_c^{h(i)}$ in der Referenzkonfiguration formuliert werden.

auf $\gamma_c^{h(i)}$ angegebene globale Geometrie- und Verschiebungsinterpolation ist definiert als

$$\mathbf{x}^{(1)}|_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} \approx \mathbf{x}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}} = \sum_{s \in \mathcal{S}} N_s^{(1)} \mathbf{x}_s^{(1)}(t), \quad (5.294)$$

$$\mathbf{x}^{(2)}|_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(2)}]} \approx \mathbf{x}^{h(2)}|_{\gamma_c^{h(2)}} = \sum_{t \in \mathcal{M}} N_t^{(2)} \mathbf{x}_t^{(2)}(t), \quad (5.295)$$

$$\mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x}^{(1)}, t)|_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} \approx \mathbf{u}^{h(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}, t)|_{\gamma_c^{h(1)}} = \sum_{s \in \mathcal{S}} N_s^{(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}) \mathbf{u}_s^{(1)}(t), \quad (5.296)$$

$$\mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{x}^{(2)}, t)|_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(2)}]} \approx \mathbf{u}^{h(2)}(\mathbf{x}^{h(2)}, t)|_{\gamma_c^{h(2)}} = \sum_{t \in \mathcal{M}} N_t^{(2)}(\mathbf{x}^{h(2)}) \mathbf{u}_t^{(2)}(t). \quad (5.297)$$

Analog zu Abschnitt 5.1 markieren die diskreten Größen $\mathbf{x}_s^{(1)} \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{x}_t^{(2)} \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{u}_s^{(1)} \in \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{u}_t^{(2)} \in \mathbb{R}^3$ die globalen knotenweise eingeführten Positions- und Verschiebungsvektoren mit einem aus der Untermenge \mathcal{S} bzw. \mathcal{M} zulässigen Index $s \in \mathcal{S}$ bzw. $t \in \mathcal{M}$. Wie bereits eingangs zu diesem Abschnitt erwähnt, werden die Ansatzfunktionen $N_s^{(1)}$ und $N_t^{(2)}$ entlang des Kopplungsrandes auf der Slave- und Master-Seite von den zugrunde liegenden Volumendiskretisierungen der interagierenden Körper durch einen einfachen Projektionsmechanismus abgeleitet.⁸⁷ Im Sinne der Methode von Bubnov-Galerkin gilt für die virtuellen Verschiebungsfelder in der Kontaktschnittstelle

$$\delta \mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x}^{(1)})|_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(1)}]} \approx \delta \mathbf{u}^{h(1)}(\mathbf{x}^{h(1)})|_{\gamma_c^{h(1)}} = \sum_{s \in \mathcal{S}} N_s^{(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}) \delta \mathbf{u}_s^{(1)}, \quad (5.298)$$

$$\delta \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{x}^{(2)})|_{\partial_c \chi_t[\mathcal{B}^{(2)}]} \approx \delta \mathbf{u}^{h(2)}(\mathbf{x}^{h(2)})|_{\gamma_c^{h(2)}} = \sum_{t \in \mathcal{M}} N_t^{(2)}(\mathbf{x}^{h(2)}) \delta \mathbf{u}_t^{(2)}, \quad (5.299)$$

mit den am Knoten $s \in \mathcal{S}$ bzw. $t \in \mathcal{M}$ deklarierten diskreten Informationsträger $\delta \mathbf{u}_s^{(1)} \in \mathbb{R}^3$ bzw. $\delta \mathbf{u}_t^{(2)} \in \mathbb{R}^3$. Entgegen der in den Gleichungen (5.296) bis (5.299)⁸⁸ verwendeten globalen Darstellung werden in Bezug auf eine konkrete FEM-Programmimplementation die slave- und master-seitigen Ansatzfunktionen, $N_s^{(1)}(\phi_t^{e(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}))$ und $N_t^{(2)}(\phi_t^{e(2)}(\mathbf{x}^{h(2)}))$, im Parameterraum des jeweiligen Oberflächenelements $\Omega_{\square}^{(i)} \subset \mathbb{R}^2$, der sich aus der zugrunde liegenden Finite-Elemente-Parametrisierung der Volumendiskretisierung $\Omega_{\square}^{(i)} \subset \mathbb{R}^3$ ableitet, als Funktion der natürlichen Koordinaten $\boldsymbol{\xi}^{(i)} = \{\xi^{(i)}, \eta^{(i)}\}^T = \phi_t^{e(i)}(\mathbf{x}^{h(i)})$ spezifiziert.⁸⁹ Für eine lokale, elementbezogene Darstellung der Geometrie-

⁸⁷Beispielsweise bedeutet dies, dass für eine Raumdiskretisierung mit 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8) die trilinearen Ansatzfunktionen an identischen Struktur- und Interfaceknoten als bilineare Formfunktionen einer Oberflächendiskretisierung mit 4-knotigen linearen Viereck-Elementen abgebildet werden.

⁸⁸Beispielsweise implizieren die Gleichungen (5.296) bis (5.299) eine Reduktion von trilinearen Interpolationsansätze in einem dreidimensionalen Gebiet zu bilinearen Ansätzen auf den Kontaktoberflächen. Innerhalb eines zweidimensionalen Kontext resultieren lineare hutförmige Geometrie- und Verschiebungsinterpolationen auf dem Kontaktrand, wenn das Gebiet mit bilinearen finiten Elementen diskretisiert wird.

⁸⁹Für den zweidimensionalen Fall werden verständlicherweise die Dimensionen für die Gebiets- und Interfacediskretisierung um eine Dimension reduziert, sodass für die natürliche Koordinate einer Oberflächenfacette $\boldsymbol{\xi}^{(i)} = \{\xi^{(i)}\} \in \mathbb{R}^1$ gilt.

und Feldvariableninterpolation im Kontext eines isoparametrischen Elementkonzepts sei auf Abschnitt 5.1 verwiesen.

Die Formulierung des unilateralen Kontaktproblems als diskretes Sattelpunktproblem verlangt neben der Approximation des Lösungsraums für die Interfacespannungen \mathcal{M}_λ durch \mathcal{M}_λ^h nach einer adäquaten Interpolation für das Lagrange-Multiplikatorfeld:

$$\lambda(\mathbf{x}^{(1)}, t) \approx \lambda^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t) = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r(\mathbf{x}^{h(1)}) \lambda_r(t) \quad (5.300)$$

In der Linearkombination (5.300) kennzeichnen Ξ_r allgemeine, globale noch zu charakterisierende Formfunktionen, siehe hierzu Abschnitt 5.5.4, und $\lambda_r \in \mathbb{R}^3$ die mit Ξ_r zu gewichtende diskrete Knotengröße am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$. Im Rahmen einer Mortar-Kontaktformulierung wird in den meisten Fällen der gesamte Knotensatz \mathcal{S} zur Approximation des Lagrange-Multiplikatorfeldes herangezogen, sodass jeder Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ sowohl mit Verschiebungs- als auch mit Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgraden, $\mathbf{u}_r^{(1)}$ und λ_r , ausgestattet ist. Abweichungen von dieser Regel sind beispielsweise bei der Behandlung von quadratischen Finite-Elemente-Diskretisierungen sinnvoll, siehe [Puso et al., 2008; Popp et al., 2012]. In der vorliegenden Arbeit wird jedoch bezogen auf ein einzelnes Slave-Element e_S , $e_S \in \{1, 2, \dots, n_c^{e(1)}\}$, stets $\hat{n}_{\text{en}}^{(1)} = n_{\text{en}}^{(1)}$ angenommen, wobei $n_{\text{en}}^{(1)}$ und $\hat{n}_{\text{en}}^{(1)}$ die dem slave-seitigen Interface-Element zugeordnete Anzahl an Knoten mit Verschiebungs- und Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgraden repräsentieren. In Anlehnung an eine mathematisch geprägte Nomenklatur können die beiden Kontaktoberflächen auch in eine Non-Mortar- und Mortar-Seite unterschieden werden. Methodisch kann dabei die Non-Mortar-Seite mit der Slave-Seite, also $\Gamma_c^{h(1)}$ bzw. $\gamma_c^{h(1)}$, und die Mortar-Seite mit der Master-Seite, d. h. $\Gamma_c^{h(2)}$ bzw. $\gamma_c^{h(2)}$, identifiziert werden. In der vorliegenden Arbeit wird jedoch nur von der Slave-Master-Nomenklatur Gebrauch gemacht.⁹⁰ Die Approximation der Lagrange-Multiplikatorvariation wird analog zu Gl. (5.300) mit den identischen globalen Ansatzfunktionen Ξ_r gebildet:

$$\delta \lambda(\mathbf{x}^{(1)}) \approx \delta \lambda^h(\mathbf{x}^{h(1)}) = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r(\mathbf{x}^{h(1)}) \delta \lambda_r \quad (5.301)$$

Alternativ rät ein von Popp et al. [2013] initiiertes Vorschlag zur Verwendung eines gemischten Petrov-Galerkin-Ansatzes bei der Interpolation von λ^h und $\delta \lambda^h$, um die im Verlauf der folgenden Ausführungen sichtbar werdenden Schwächen der Mortar-Methode in Kombination mit dualen Formfunktionen zu kompensieren.

Für die Formulierung von diskreten Kontaktbedingungen werden neben den Beziehungen (5.300) und (5.301) auch Approximationen für die Normalkomponenten, λ_N^h und $\delta \lambda_N^h$, sowie Interpolationsansätze für die in Tangentialrichtung wirkenden Anteile, λ_τ^h und $\delta \lambda_\tau^h$,

⁹⁰Siehe auch Fußnote 83.

benötigt.⁹¹ Nach Hübner [2008] gilt:

$$\lambda_N \approx \lambda_N^h = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r \lambda_{Nr}, \quad \delta \lambda_N \approx \delta \lambda_N^h = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r \delta \lambda_{Nr}, \quad (5.302)$$

$$\lambda_\tau \approx \lambda_\tau^h = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r \lambda_{\tau r}, \quad \delta \lambda_\tau \approx \delta \lambda_\tau^h = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r \delta \lambda_{\tau r} \quad (5.303)$$

Mit Bezug auf Gleichung (4.53) entsprechen die Skalare

$$\lambda_{Nr} = \mathbf{n}_r^T \lambda_r, \quad \text{und} \quad \delta \lambda_{Nr} = \mathbf{n}_r^T \delta \lambda_r \quad (5.304)$$

den Projektionen von λ_r und $\delta \lambda_r$ in Richtung des im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ errichteten Einheitsnormalenvektors \mathbf{n}_r .⁹² Die tangentialen Projektionen $\lambda_{\tau r} \in \mathbb{R}^3$ und $\delta \lambda_{\tau r} \in \mathbb{R}^3$ im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ resultieren unter Referenz auf Gl. (4.54) aus

$$\lambda_{\tau r} = [\mathbf{I}_3 - [\mathbf{n}_r \mathbf{n}_r^T]] \lambda_r, \quad \text{und} \quad \delta \lambda_{\tau r} = [\mathbf{I}_3 - [\mathbf{n}_r \mathbf{n}_r^T]] \delta \lambda_r, \quad (5.305)$$

mit der Einheitsmatrix $\mathbf{I}_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Alternativ kann Gl. (5.305) mittels der aus den ortho-normierten Vektoren $\boldsymbol{\tau}_{\xi r}$ und $\boldsymbol{\tau}_{\eta r}$ bestehenden Tangentialbasis in $r \in \mathcal{S}$, deren Tangentialvektoren spaltenweise in der Matrix

$$\boldsymbol{\tau}_r = [\boldsymbol{\tau}_{\xi r}, \boldsymbol{\tau}_{\eta r}] \in \mathbb{R}^{3 \times 2} \quad (5.306)$$

angeordnet werden, und Ausnutzung der Identität $[\mathbf{I}_3 - [\mathbf{n}_r \mathbf{n}_r^T]] = \boldsymbol{\tau}_r \boldsymbol{\tau}_r^T$ zu

$$\lambda_{\tau r} = \boldsymbol{\tau}_r \boldsymbol{\tau}_r^T \lambda_r = \boldsymbol{\tau}_r \lambda_{Tr}, \quad \delta \lambda_{\tau r} = \boldsymbol{\tau}_r \boldsymbol{\tau}_r^T \delta \lambda_r = \boldsymbol{\tau}_r \delta \lambda_{Tr} \quad (5.307)$$

umgeschrieben werden. Die Komponenten der in die Tangentialebene projizierten Knotengrößen λ_r und $\delta \lambda_r$ sind in

$$\lambda_{Tr} = \begin{Bmatrix} \lambda_{\xi r} \\ \lambda_{\eta r} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\tau}_r^T \lambda_r \in \mathbb{R}^2 \quad \text{und} \quad \delta \lambda_{Tr} = \begin{Bmatrix} \delta \lambda_{\xi r} \\ \delta \lambda_{\eta r} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\tau}_r^T \delta \lambda_r \in \mathbb{R}^2 \quad (5.308)$$

zusammengefasst. Zur Entwicklung einer matriziellen Schreibweise empfiehlt es sich zudem, die diskreten Knotenwerte der Lagrange-Multiplikatoren $\lambda_r \in \mathbb{R}^3$, $r \in \mathcal{S}$, und deren Variation $\delta \lambda_r \in \mathbb{R}^3$, $r \in \mathcal{S}$, in den Gesamtvektoren

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda} &= \mathbf{A} \lambda_r = \left\{ \lambda_1^T, \dots, \lambda_{n_S}^T \right\}^T \in \mathbb{R}^{n_{us}} \quad \text{und} \\ \delta \boldsymbol{\lambda} &= \mathbf{A} \delta \lambda_r = \left\{ \delta \lambda_1^T, \dots, \delta \lambda_{n_S}^T \right\}^T \in \mathbb{R}^{n_{us}} \end{aligned} \quad (5.309)$$

⁹¹Im Rahmen der vorgestellten mortar-basierten Kontaktformulierung ist es nicht üblich, die Normal-komponenten durch $\lambda_N^h = \mathbf{n}^{hT} \lambda^h$ bzw. $\delta \lambda_N^h = \mathbf{n}^{hT} \delta \lambda^h$, mit dem approximierten Normalenvektorfeld \mathbf{n}^h , zu berechnen, siehe hierzu exemplarisch [Hartmann, 2007; Hübner, 2008]. Identisches gilt für die Anteile in Tangentialrichtung.

⁹²Für weiterführende Details zur Konstruktion von \mathbf{n}_r , $r \in \mathcal{S}$, wird auf die Abschnitte 5.5.2 und 5.5.3 verwiesen.

zu vereinigen. Der Operator \mathbf{A} kennzeichnet dabei den im Rahmen der Finite-Elemente-Methode verwendeten Standard-Assemblierungsoperator und wird im Folgenden zur Verkürzung der Notation bevorzugt eingesetzt. Für die diskreten Knotenwerte der Verschiebungen und deren virtuellen Gegenstücke gelten die analogen Beziehungen:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_S &= \mathbf{A}_{r \in \mathcal{S}} \mathbf{u}_r^{(1)} = \left\{ \mathbf{u}_1^{(1)\text{T}}, \dots, \mathbf{u}_{n_S^n}^{(1)\text{T}} \right\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}, \\ \mathbf{u}_M &= \mathbf{A}_{t \in \mathcal{M}} \mathbf{u}_t^{(2)} = \left\{ \mathbf{u}_1^{(2)\text{T}}, \dots, \mathbf{u}_{n_M^n}^{(2)\text{T}} \right\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}}, \\ \delta \mathbf{u}_S &= \mathbf{A}_{r \in \mathcal{S}} \delta \mathbf{u}_r^{(1)} = \left\{ \delta \mathbf{u}_1^{(1)\text{T}}, \dots, \delta \mathbf{u}_{n_S^n}^{(1)\text{T}} \right\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}, \\ \delta \mathbf{u}_M &= \mathbf{A}_{t \in \mathcal{M}} \delta \mathbf{u}_t^{(2)} = \left\{ \delta \mathbf{u}_1^{(2)\text{T}}, \dots, \delta \mathbf{u}_{n_M^n}^{(2)\text{T}} \right\}^T \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}} \end{aligned} \quad (5.310)$$

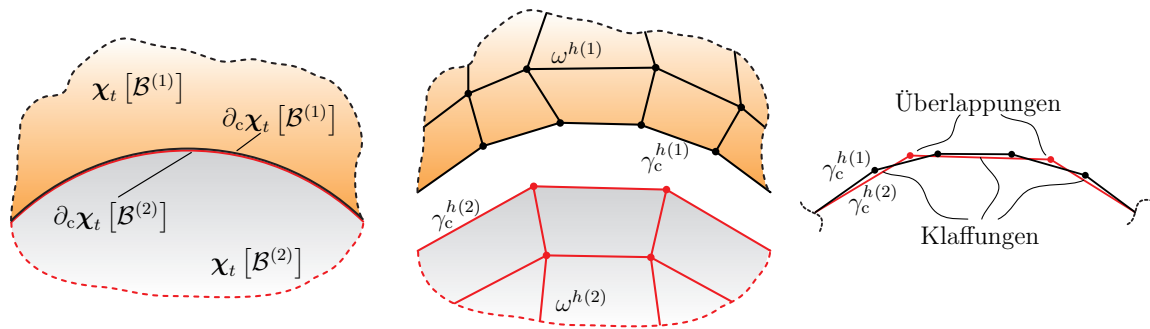
Diskrete Form der virtuellen Kontaktarbeit Die Substitution der diskreten globalen Ansätze (5.298) bis (5.300) in den Ausdruck für die virtuelle Kontaktarbeit (4.52) führt auf

$$\begin{aligned} \delta \pi_c &\approx \delta \pi_c^h(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \\ &= \int_{\gamma_c^{h(1)}} \left\{ \delta \mathbf{u}^{h(1)} \Big|_{\gamma_c^{h(1)}} - \left(\delta \mathbf{u}^{h(2)} \Big|_{\gamma_c^{h(2)}} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h \right) \right\}^T \boldsymbol{\chi}^h d\gamma \\ &= \sum_{r \in \mathcal{S}} \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \delta \mathbf{u}_s^{(1)\text{T}} \left(\int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r N_s^{(1)} d\gamma \right) - \sum_{t \in \mathcal{M}} \delta \mathbf{u}_t^{(2)\text{T}} \left(\int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r \left(N_t^{(2)} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h \right) d\gamma \right) \right\} \boldsymbol{\lambda}_r, \end{aligned} \quad (5.311)$$

wobei die in der obigen Verkettung benutzte diskrete Version der Interfaceabbildung⁹³ $\boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h : \gamma_c^{h(1)} \times \mathbb{I} \rightarrow \gamma_c^{h(2)}$ einen Wechsel der Variablen von der Slave- auf die Master-Seite impliziert.⁹⁴ Wie bereits zuvor im Rahmen der kontinuumsmechanischen Betrachtungen in Abschnitt 4.4 argumentiert, ist einerseits solch ein Projektionsoperator notwendig, um die numerische Integration exklusiv auf der Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ des Kontakt-Interface auszuführen. Aufgrund der Tatsache, dass die zu koppelnden Ränder $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$ im Kontaktfall nicht länger koinzident zueinander sein müssen, übernimmt die Zuordnungsvorschrift $\boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h$ weiterhin die essentielle Aufgabe der Identifikation von master-seitigen Projektionspunkten an denen die Ansatzfunktionen $N_t^{(2)}$, $t \in \mathcal{M}$, ausgewertet werden. Abb. 5.6 visualisiert den geschilderten Sachverhalt anhand eines exemplarischen Beispiels für ein gekrümmtes Kontakt-Interface mit nicht-konformer Vernetzung in 2D, bei dem infolge von Klaffungen und Überschneidungen eine direkte Zuordnung von ursprünglich

⁹³Die Verknüpfungsoperation $N_t^{(2)} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h$ ist identisch zur Schreibweise $N_t^{(2)} \left(\boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h(\mathbf{x}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}}, t) \right)$.

⁹⁴Zur Vereinfachung der Schreibweise soll im Folgenden die Deformationsabhängigkeit für $\delta \pi_c^h$ und alle hiervon abgeleiteten Größen durch \mathbf{u} angegeben werden. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass in die Interfacediskretisierung lediglich globale Verschiebungsfreiheitsgrade auf $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$ einfließen. Daher kann $\delta \pi_c^h(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})$ gleichwertig zu $\delta \pi_c^h(\mathbf{u}_S, \mathbf{u}_M, \delta \mathbf{u}_S, \delta \mathbf{u}_M, \boldsymbol{\lambda})$ umformuliert werden. Durch die obige Ausblendung der zeitabhängigen Randbedingungen in den mit \mathcal{S} und \mathcal{M} verknüpften Knotenverschiebungen entfällt eine explizite temporale Abhängigkeit in Gl. (5.311), wie sie beispielsweise zuvor bei den Ausdrücken (5.52) und (5.65) auftrat.



(a) Kontinuumsmechanische Version (b) Diskretisierte Version (c) Diskretisiertes Interface

Abbildung 5.6: Schematische Skizze eines gekrümmten Kontakt-Interface (Ausschnitt) mit nicht-konformer FE-Vernetzung in 2D

koinzidenten Punkten nicht länger möglich ist. In einer Vielzahl von wissenschaftlichen Veröffentlichungen wird daher die Mortar-Methode auch als Mortar-Projektionsmethode bezeichnet. Darüber hinaus ist offensichtlich, dass sich die diskrete Version der virtuellen Kontaktarbeit (5.311) aus zwei unterschiedlichen Arten von Integralen

$$\hat{D}_{rs}(\mathbf{u}) = \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r N_s^{(1)} d\gamma, \quad r \in \mathcal{S}, \quad s \in \mathcal{S}, \quad (5.312)$$

$$\hat{M}_{rt}(\mathbf{u}) = \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r \left(N_t^{(2)} \circ \chi_{\gamma_c}^h \right) d\gamma, \quad r \in \mathcal{S}, \quad t \in \mathcal{M}, \quad (5.313)$$

welche im Folgenden als Mortar-Integrale bezeichnet werden, zusammensetzt. In Kombination mit den knotenweise definierten Blöcken

$$\hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u}) = \hat{D}_{rs}(\mathbf{u}) \mathbf{I}_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad r \in \mathcal{S}, \quad s \in \mathcal{S}, \quad (5.314)$$

$$\hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u}) = \hat{M}_{rt}(\mathbf{u}) \mathbf{I}_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad r \in \mathcal{S}, \quad t \in \mathcal{M}, \quad (5.315)$$

auf Basis der Einheitsmatrix $\mathbf{I}_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ in \mathbb{R}^3 resultiert

$$\delta \pi_c^h(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \sum_{r \in \mathcal{S}} \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \delta \mathbf{u}_s^{(1)T} \hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u}) - \sum_{t \in \mathcal{M}} \delta \mathbf{u}_t^{(2)T} \hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u}) \right\} \boldsymbol{\lambda}_r. \quad (5.316)$$

Zudem gelingt es formal die Untermatrizen $\hat{\mathbf{D}}_{rs}$ und $\hat{\mathbf{M}}_{rt}$ in die globalen algebraischen Strukturen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) &= \mathbf{A}_{r \in \mathcal{S}, s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u}) = \left[\hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u}) \right] \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}} \quad \text{und} \\ \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) &= \mathbf{A}_{r \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u}) = \left[\hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u}) \right] \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuM}}, \end{aligned} \quad (5.317)$$

die sogenannten Mortar-Matrizen, zusammenzufassen.

Anmerkung 4 Es sei explizit an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuM}}$, als globale Kopplungsmatrix der betrachteten mortar-basierten

Kontaktdiskretisierung, nicht mit den Massenmatrizen $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}$ oder $\bar{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{up}}$ verwechselt werden darf. In Verbindung mit der gewählten Nomenklatur sind die genannten Größen nur anhand eines Akzents zu unterscheiden.

Infolge der Auswertung von \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} in Bezug auf die Momentankonfiguration resultiert für die Kopplungseinträge eine geometrisch nichtlineare Deformationsabhängigkeit in Gestalt von $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, die sich auf alle hiervon abgeleiteten Größen überträgt. Alle weiteren relevanten technischen Details zur eigentlichen algorithmischen Umsetzung der Massenmatrix ähnlichen Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}$ und $\hat{\mathbf{M}}$, insbesondere die Auswertung der Oberflächenintegrale (5.312) und (5.313), sowie zur Implementation der Projektionsabbildung $\chi_{\gamma_c}^h$ werden in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 nachgereicht. Alternativ lässt sich Gl. (5.316) unter Verwendung der Kopplungsmatrizen (5.317), den zu Eingang dieses Abschnitts deklarierten Untermengen \mathcal{S} , \mathcal{M} und \mathcal{N} sowie Definition (5.309)₁ in matrizieller Schreibweise als

$$\begin{aligned} \delta\pi_c^h(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) &= \left\{ \delta\mathbf{u}_S^T \hat{\mathbf{D}}^T(\mathbf{u}) - \delta\mathbf{u}_M^T \hat{\mathbf{M}}^T(\mathbf{u}) \right\} \boldsymbol{\lambda} \\ &= \delta\mathbf{u}^T \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{uuN} \times n_{uuS}} \\ \hat{\mathbf{D}}^T(\mathbf{u}) \\ -\hat{\mathbf{M}}^T(\mathbf{u}) \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} = \delta\mathbf{u}^T \hat{\mathbf{B}}^T(\mathbf{u}) \boldsymbol{\lambda} = \delta\mathbf{u}^T \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \end{aligned} \quad (5.318)$$

darstellen. Hierin repräsentiert die globale rechteckige Matrix $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{u})$ den deformationsabhängigen Interface-Operator

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{uuS} \times n_{uuN}} & \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) & -\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uu}}, \quad (5.319)$$

dessen lineare Abbildung aus transponierter Matrix $\hat{\mathbf{B}}^T(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uuS}}$ und dem Spaltenvektor $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ den auf die Slave- und Master-Oberfläche wirkenden Kontaktkraftvektor

$$\mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{f}_c^{(1)}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \\ \mathbf{f}_c^{(2)}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \end{Bmatrix} = \hat{\mathbf{B}}^T(\mathbf{u}) \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uu}} \quad (5.320)$$

definiert. Infolge der aus den Mortar-Matrizen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u})$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u})$ resultierenden nichtlinearen Abhängigkeit vom Deformationszustand sind auch der Kontaktkraftvektor $\mathbf{f}_c \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ bzw. dessen Subvektoren $\mathbf{f}_c^{(1)}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \hat{\mathbf{D}}^T \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ und $\mathbf{f}_c^{(2)}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = -\hat{\mathbf{M}}^T \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uuM}}$ neben $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ von den unbekannten Knotenverschiebungen $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ abhängig. Das Hauptaugenmerk des folgenden Paragraphen liegt auf der Diskretisierung der in Normal- und Tangentialrichtung separierten Variationsformulierungen für die Kontaktbedingungen.

Diskrete Form der Normalkontaktbedingungen Wie Gitterle [2012] detailliert zeigt, führt die Substitution der Interpolationsansätze (5.294), (5.295) und (5.302) in Gl. (4.57) sowie die Ausnutzung der Definition (3.4) für die diskretisierte Klaffung

$$g^h = -\mathbf{n}^{hT} \left\{ \mathbf{x}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}} - \left(\mathbf{x}^{h(2)}|_{\gamma_c^{h(2)}} \circ \chi_{\gamma_c}^h \right) \right\} \quad (5.321)$$

auf das Resultat

$$\begin{aligned}
 \delta\pi_N &\approx \delta\pi_N^h(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \delta\boldsymbol{\lambda}) = \int_{\gamma_c^{h(1)}} g^h(\delta\lambda_N^h - \lambda_N^h) d\gamma \quad (5.322) \\
 &= - \int_{\gamma_c^{h(1)}} (\delta\lambda_N^h - \lambda_N^h) \left(\mathbf{n}^{hT} \left\{ \mathbf{x}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}} - \left(\mathbf{x}^{h(2)}|_{\gamma_c^{h(2)}} \circ \chi_{\gamma_c}^h \right) \right\} \right) d\gamma \\
 &= - \sum_{r \in \mathcal{S}} (\delta\lambda_{Nr} - \lambda_{Nr}) \left(\sum_{s \in \mathcal{S}_{\gamma_c^{h(1)}}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r \mathbf{n}^{hT} N_s^{(1)} d\gamma \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}_{\gamma_c^{h(1)}}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r \mathbf{n}^{hT} (N_t^{(2)} \circ \chi_{\gamma_c}^h) d\gamma \mathbf{x}_t^{(2)} \right) \\
 &\approx - \sum_{r \in \mathcal{S}} (\delta\lambda_{Nr} - \lambda_{Nr}) \mathbf{n}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}_{\gamma_c^{h(1)}}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r N_s^{(1)} d\gamma \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}_{\gamma_c^{h(1)}}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r (N_t^{(2)} \circ \chi_{\gamma_c}^h) d\gamma \mathbf{x}_t^{(2)} \right\} \\
 &\geq 0 \quad \forall \delta\boldsymbol{\lambda}^h \in \mathcal{M}_{\boldsymbol{\lambda}}^h. \quad (5.323)
 \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung von Gl. (5.323) fließt die Hypothese ein, dass das räumlich interpolierte Normalenvektorfeld \mathbf{n}^h , welches in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 eingeführt wird, in der lokalen Umgebung von $r \in \mathcal{S}$ durch den Einheitsnormalenvektor \mathbf{n}_r angenähert werden kann. Unter Berücksichtigung dieser wissenschaftlich oft angewendeten Mittelungsprozedur für \mathbf{n}^h sowie den Definitionen (5.314) und (5.315) kann aus der diskreten Form (5.323) die sogenannte gewichtete Normalklaffung

$$\tilde{g}_r(\mathbf{u}) = -\mathbf{n}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs} \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt} \mathbf{x}_t^{(2)} \right\} = -\mathbf{n}_r^T \tilde{\mathbf{g}}_r(\mathbf{u}) \quad \text{bezogen auf } r \in \mathcal{S} \quad (5.324)$$

abgeleitet werden, siehe hierzu auch [Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Yang et al., 2005; Hartmann, 2007; Hartmann und Ramm, 2008; Popp et al., 2009; Gitterle et al., 2010; Cichosz und Bischoff, 2011; Cichosz, 2012; Cavalieri und Cardona, 2013a; Farah et al., 2015]. Zusätzlich sei an dieser Stelle die Definition des gewichteten Abstandsvektors

$$\tilde{\mathbf{g}}_r(\mathbf{u}) = \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs} \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt} \mathbf{x}_t^{(2)}, \quad r \in \mathcal{S}, \quad (5.325)$$

angegeben, der eine zentrale Rolle für die Darstellungen des nachfolgenden Paragraphen einnimmt. Nach Einsetzen der fundamentalen diskreten Knotengröße \tilde{g}_r in Gl. (5.323) kann diese kompakt zu

$$\sum_{r \in \mathcal{S}} (\delta\lambda_{Nr} - \lambda_{Nr}) \tilde{g}_r \geq 0 \quad \forall \delta\boldsymbol{\lambda}^h \in \mathcal{M}_{\boldsymbol{\lambda}}^h \quad (5.326)$$

umgeschrieben werden. Konsequenterweise führt dies für jeden Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ auf die diskrete knotenweise entkoppelte Variationsungleichung

$$(\delta\lambda_{Nr} - \lambda_{Nr}) \tilde{g}_r \geq 0 \quad \forall \delta\lambda_{Nr} \geq 0. \quad (5.327)$$

Wie Hübner [2008] in großer mathematischer Tiefe ausgehend von Gl. (5.322) veranschaulicht, kann Gl. (5.327) durch geeignete Festlegung des endlichdimensionalen Lösungsraums

\mathcal{M}_λ^h , welcher unter anderem $\lambda_{Nr} \geq 0$ und $\delta\lambda_{Nr} \geq 0$, $r \in \mathcal{S}$, impliziert, in eine diskrete Formulierung der originalen KKT-Bedingungen (3.23) überführt werden:⁹⁵

$$\tilde{g}_r \geq 0, \quad \lambda_{Nr} \geq 0, \quad \tilde{g}_r \lambda_{Nr} = 0 \quad \forall r \in \mathcal{S} \quad (5.328)$$

Die Äquivalenz zwischen der Variationsungleichung (5.327) und Gl. (5.328) wurde darüber hinaus bereits in Abschnitt 4.4.2 im Rahmen einer kontinuumsmechanischen Betrachtung postuliert. Obwohl der Satz von punktweise entkoppelten Bedingungen (5.328) im Vergleich zu klassischen „Knoten-Segment“-Diskretisierungen (NTS) eine identische Gestalt aufweist, enthält der vorgestellte mortar-basierte Ansatz (5.328) ein erheblich gesteigertes Maß an Informationen. Dieser Sachverhalt wird angesichts des zugrunde liegenden Variationsansatzes algebraisch durch die integral formulierte Klaffung (5.324) reflektiert. Abschließend sei angemerkt, dass in der Literatur keine einheitliche Definition der gewichteten Abstandsfunktion existiert. Neben der in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden Deklaration (5.324) für \tilde{g}_r machen einige Autoren wie z. B. Hübner et al. [2008], Hübner [2008], Popp et al. [2010], Popp [2012], Gitterle [2012], Popp et al. [2013] und Popp und Wall [2014] von der Variante

$$\tilde{g}_r = \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r g^h d\gamma, \quad r \in \mathcal{S}, \quad (5.329)$$

mit der diskreten Version der in Gl. (5.321) interpolierten Feldvariable g^h , Gebrauch. Die Beziehung (5.329) geht aus Gl. (5.322) hervor, wenn die zuvor getroffene Annahme für das räumlich diskretisierte Normalenvektorfeld \mathbf{n}^h , d. h. $\mathbf{n}^h \approx \mathbf{n}_r$ in der Nähe von $r \in \mathcal{S}$, fallen gelassen wird.

Diskrete Form der Kontaktbedingungen in Tangentialrichtung Die Ableitung der diskreten Form für die variationell formulierten, reibungsbehafteten Tangentialkontaktbedingungen verläuft kongruent zum vorhergehenden Teilabschnitt. Bezugnehmend auf die Arbeit von Gitterle [2012] gelingt es durch Substitution der Interpolationsansätze (5.303) und des Geschwindigkeitsfeldes

$$\mathbf{v}^{h(i)}|_{\gamma_c^{h(i)}} = \dot{\mathbf{x}}^{h(i)}|_{\gamma_c^{h(i)}}, \quad i = 1, 2, \quad (5.330)$$

sowie unter Rekapitulation der Definition der tangentialen Relativgeschwindigkeit (3.19), welche in Analogie zu Gl. (5.307) mit der Matrix der räumlich interpolierten Tangentialvektoren

$$\boldsymbol{\tau}^h = [\boldsymbol{\tau}_\xi^h, \boldsymbol{\tau}_\eta^h] \in \mathbb{R}^{3 \times 2} \quad (5.331)$$

die Gestalt

$$\mathbf{v}_\tau^h = \boldsymbol{\tau}^h \boldsymbol{\tau}^{hT} \left\{ \mathbf{v}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}} - \left(\mathbf{v}^{h(2)}|_{\gamma_c^{h(2)}} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h \right) \right\} \in \mathbb{R}^3 \quad (5.332)$$

⁹⁵Der mathematische Beweis für die Äquivalenz zwischen Gl. (5.327) und Gl. (5.328) nach Hübner [2008] gründet auf der noch einzuführenden Biorthogonalitätsbedingung, siehe Abschnitt 5.5.4.2, sodass der angegebene Satz von diskreten KKT-Bedingungen streng genommen nur für Duale-Lagrange-Multiplikator-Interpolationen Gültigkeit besitzt. Im Fall von Standard-Lagrange-Multiplikator-Interpolationen bedarf es bei der Umwandlung von Gl. (5.327) nach Gl. (5.328) einer Approximation, siehe hierzu ebenfalls [Hübner, 2008].

annimmt, die in schwacher Form angegebene Kontaktbedingung (4.58) in den semidiskreten Ausdruck

$$\begin{aligned}
 \delta\pi_\tau &\approx \delta\pi_\tau^h(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}, \delta\boldsymbol{\lambda}) = \int_{\gamma_c^{h(1)}} \mathbf{v}_\tau^{hT} \{ \delta\boldsymbol{\lambda}_\tau^h - \boldsymbol{\lambda}_\tau^h \} d\gamma \\
 &= \int_{\gamma_c^{h(1)}} \{ \delta\boldsymbol{\lambda}_\tau^h - \boldsymbol{\lambda}_\tau^h \}^T \boldsymbol{\tau}^h \boldsymbol{\tau}^{hT} \left\{ \mathbf{v}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}} - \left(\mathbf{v}^{h(2)}|_{\gamma_c^{h(2)}} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h \right) \right\} d\gamma \\
 &= \sum_{r \in \mathcal{S}} \{ \delta\boldsymbol{\lambda}_{\tau r} - \boldsymbol{\lambda}_{\tau r} \}^T \left\{ \int_{\gamma_c^{h(1)}} \boldsymbol{\tau}^h \boldsymbol{\tau}^{hT} \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \Xi_r N_s^{(1)} d\gamma \dot{\mathbf{x}}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \Xi_r \left(N_t^{(2)} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h \right) \dot{\mathbf{x}}_t^{(2)} \right\} d\gamma \right\} \\
 &\approx \sum_{r \in \mathcal{S}} \{ \delta\boldsymbol{\lambda}_{\tau r} - \boldsymbol{\lambda}_{\tau r} \}^T \boldsymbol{\tau}_r \boldsymbol{\tau}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r N_s^{(1)} d\gamma \dot{\mathbf{x}}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r \left(N_t^{(2)} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h \right) d\gamma \dot{\mathbf{x}}_t^{(2)} \right\} \\
 &= \sum_{r \in \mathcal{S}} \{ \delta\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} - \boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} \}^T \boldsymbol{\tau}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r N_s^{(1)} d\gamma \dot{\mathbf{x}}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r \left(N_t^{(2)} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h \right) d\gamma \dot{\mathbf{x}}_t^{(2)} \right\} \\
 &\leq 0 \quad \forall \delta\boldsymbol{\lambda}^h \in \mathcal{M}_\lambda^h
 \end{aligned} \tag{5.333}$$

zu überführen. Wie zuvor wird die Matrix mit den Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}^h \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ in der lokalen Umgebung des Slave-Knotens $r \in \mathcal{S}$ durch $\boldsymbol{\tau}_r$ ersetzt. Der letzte Umformungsschritt in Gl. (5.333) greift auf die Beziehungen in Gl. (5.308) zur Generierung der Komponentenvektoren in der Tangentialebene, $\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} \in \mathbb{R}^2$ und $\delta\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} \in \mathbb{R}^2$, sowie auf die Identität $\boldsymbol{\tau}_r^T \boldsymbol{\tau}_r = \mathbf{I}_2$ zurück. Unter Berücksichtigung der Gleichungen (5.314) und (5.315) und in Kombination mit der vorläufigen Definition der gewichteten tangentialen Relativgeschwindigkeit eines Slave-Knotens $s \in \mathcal{S}$ bezogen auf die orthonormierte Tangentialbasis⁹⁶

$$\tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}} = \begin{Bmatrix} \tilde{v}_{\xi r} \\ \tilde{v}_{\eta r} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\tau}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs} \dot{\mathbf{x}}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt} \dot{\mathbf{x}}_t^{(2)} \right\} \in \mathbb{R}^2, \quad r \in \mathcal{S}, \tag{5.334}$$

gelingt es, die diskretisierte Variationsungleichung (5.333) kompakt durch

$$\sum_{r \in \mathcal{S}} \{ \delta\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} - \boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} \}^T \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}} \leq 0 \quad \forall \delta\boldsymbol{\lambda}^h \in \mathcal{M}_\lambda^h \tag{5.335}$$

umzuschreiben. Mit den im endlichdimensionalen Lösungsraums \mathcal{M}_λ^h verankerten Restriktionen des Coulombschen Reibmodells, welche in Verbindung mit dem konstanten Reibkoeffizienten μ_c unter anderem $\|\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}}\| \leq \mu_c \lambda_{\text{Nr}}$ und $\|\delta\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}}\| \leq \mu_c \delta\lambda_{\text{Nr}}$ zur Folge haben, lautet die punktweise entkoppelte Kontaktbedingung in der Tangentialebene

$$\{ \delta\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} - \boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} \}^T \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}} \leq 0 \quad \forall \delta\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}}, \text{ mit } \|\delta\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}}\| \leq \mu_c \delta\lambda_{\text{Nr}}, \quad \|\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}}\| \leq \mu_c \lambda_{\text{Nr}}. \tag{5.336}$$

In Analogie zu Abschnitt 4.4.2, lediglich in umgekehrter Reihenfolge, wird die Variationsungleichung (5.336) in das äquivalente Komplementärproblem

$$\begin{aligned}
 f_{\tau r} &= \|\boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}}\| + \mu_c |\lambda_{\text{Nr}}| \\
 \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}} - \tilde{\gamma}_{\tau r} \boldsymbol{\lambda}_{\text{Tr}} &= \mathbf{0}, \quad \tilde{\gamma}_{\tau r} \geq 0, \quad f_{\tau r} \leq 0, \quad \tilde{\gamma}_{\tau r} f_{\tau r} = 0 \quad \forall r \in \mathcal{S}.
 \end{aligned} \tag{5.337}$$

⁹⁶Entgegen Gl. (5.332) definiert $\tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}$ einen 3 – 1 mannigfaltigen Vektor mit Komponenten in Bezug auf die in $s \in \mathcal{S}$ errichtete orthonormierte Tangentialbasis, welche aus den Basisvektoren $\boldsymbol{\tau}_{\xi r}$ und $\boldsymbol{\tau}_{\eta r}$ konstruiert wird.

überführt, siehe hierzu [Hüeber, 2008].

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die integralen Beschreibungen (4.57) und (4.58) für jeden Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ als punktweise entkoppelte, diskrete Formen von normalen, siehe Gl. (5.328), und tangentialen Kontaktbedingungen, siehe Gl. (5.337), vorliegen. Darüber hinaus weisen die diskreten, in KKT-Gestalt definierten Kopplungsbedingungen (5.328) und (5.337) eine identische Struktur zu den kontinuierlichen Gegenständen (3.23) und (3.25) auf. Im Vergleich zu traditionellen NTS-Diskretisierungstechniken besitzt jedoch die vorgestellte mortar-basierte Kontaktformulierung, bedingt durch die integral formulierten kinematischen Größen \tilde{g}_r und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$, einen signifikant vergrößerten Informationsradius und führt so zu einer realistischeren Erzwingung der Kontaktbedingungen.

Neben den reibungsbehafteten Satz von Schlupfbedingungen (5.337) wird in der vorliegenden Arbeit auch der Fall des reibungsfreien Kontakts behandelt. Unter Anpassung des diskreten Lösungsraums \mathcal{M}_λ^h , siehe hierzu exemplarisch [Popp, 2012], vereinfachen sich die tangentialen Kontaktbedingungen mit dem am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ definierten vektorwertigen Lagrange-Multiplikator λ_r zu

$$\lambda_{Tr} = \tau_r^T \lambda_r = \mathbf{0} \quad \forall r \in \mathcal{S}. \quad (5.338)$$

Konstruktion einer objektiven, diskreten tangentialen Relativgeschwindigkeit In Kapitel 3 wurde bereits angeführt, dass die aus einer kontinuumsmechanischen Betrachtungsweise heraus festgelegte Definition (3.19) für den in die Tangentialebene projizierten Relativgeschwindigkeitsvektor nur für den Fall des perfekten Gleitens eine objektive Schlupfrate darstellt, siehe hierzu [Laursen, 2003]. Wie Gitterle [2012] zeigt, trifft dies auch auf die diskrete Version (5.334) zu. Die Eigenschaft der Beobachter-Indifferenz von $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$ wird nur gewährleistet, falls das Kriterium $\tilde{\mathbf{g}}_r = \mathbf{0}$ erfüllt ist. Bei Anwendung der vorgestellten mortar-basierten Finite-Elemente-Methode auf Interfaceprobleme mit gekrümmten Oberflächen kann jedoch diese Voraussetzung, wie unter anderem auch [Puso und Laursen, 2004b; Yang et al., 2005] proklamieren, nicht länger aufrechterhalten werden, d. h. $\tilde{\mathbf{g}}_r \neq \mathbf{0}$. Die Nichtdurchdringungsbedingung (5.328)₁ erzwingt im Fall eines aktiven Slave-Knotens lediglich $\tilde{g}_r = 0$, sodass die normale Projektion von $\tilde{\mathbf{g}}_r$ gemäß Gl. (5.324) den Wert Null annimmt.⁹⁷ Die Konsequenz der fehlenden Invarianzeigenschaft für $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$ ist, dass die Beschreibung von Haften und Gleiten in der Kontaktschnittstelle bei rein in Form einer Starrkörperbewegung driftenden Strukturen nicht korrekt wiedergegeben werden kann. Abhilfe für die beschriebene Problematik schafft eine ursprünglich von [Puso und Laursen, 2004b] eingeführte algorithmische Modifikation, welche die Eigenschaft der Beobachter-Indifferenz für die gewichtete Schlupfrate $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$ erhält und so räumlich objektiv formulierte, reibungsbehaftete Kontaktbedingungen ermöglicht. Für weitere Informationen zu dem im Folgenden verdichtet präsentierten Ansatz sei auf [Puso und Laursen, 2004b; Yang et al., 2005; Yang und Laursen, 2007; Puso et al., 2008; Gitterle, 2012; Laursen et al., 2012] verwiesen. Ausgangspunkt bildet analog zum

⁹⁷Die potentielle Diskrepanz zwischen $\tilde{g}_r = 0$ und $\tilde{\mathbf{g}}_r \neq \mathbf{0}$ ist ein Resultat aus der räumlichen Interfacediskretisierung. Im Rahmen einer kontinuierlichen Problembeschreibung, vgl. Gl. (3.17) und Gl. (3.18) in Abschnitt 3.1, sind beide Aussagen identisch.

kontinuierlichen Fall die Definition des räumlichen Relativgeschwindigkeitsvektors, welcher wiederum auf der materiellen Zeitableitung des Abstandsvektors (5.325) aufbaut, siehe auch [Laursen, 2003, S. 116–119]. Im Rahmen der angewendeten mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie gilt für die zuletzt genannte Größe:

$$\dot{\mathbf{g}}_r = \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs} \dot{\mathbf{x}}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt} \dot{\mathbf{x}}_t^{(2)} \right\} + \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs} \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt} \mathbf{x}_t^{(2)} \right\}, \quad r \in \mathcal{S} \quad (5.339)$$

Obwohl, wie zuvor angedeutet, in den meisten Fällen $\tilde{\mathbf{g}}_r \neq \mathbf{0}$ gilt, kann doch in guter Näherung

$$\dot{\mathbf{g}}_r \approx \mathbf{0} \Leftrightarrow \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs} \dot{\mathbf{x}}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt} \dot{\mathbf{x}}_t^{(2)} \right\} = - \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs} \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt} \mathbf{x}_t^{(2)} \right\} \quad (5.340)$$

postuliert werden. Wird mit Hilfe der Matrix der Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}_r$ der linke Klammerausdruck in die Tangentialebene projiziert, resultiert das nicht-objektive Geschwindigkeitsmaß (5.334). Der rechte Klammerausdruck in Gl. (5.340), mit den materiellen Zeitableitungen der Submatrizen $\dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs} = \dot{\hat{D}}_{rs} \mathbf{I}_3$ und $\dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt} = \dot{\hat{M}}_{rt} \mathbf{I}_3$, verhält sich im Fall einer reinen Starrkörperbewegung hingegen beobachter-indifferent. Aufgrund des beständigen Deformationszustands sind die skalaren Einträge \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} der Kopplungsmatrizen konstant, wodurch auch deren Zeitableitungen $\dot{\hat{D}}_{rs}$ und $\dot{\hat{M}}_{rt}$ verschwinden. Aus diesem Grund gilt für den geschilderten Spezialfall $\dot{\hat{\mathbf{D}}} = [\dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs}] = \mathbf{0}$ und $\dot{\hat{\mathbf{M}}} = [\dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt}] = \mathbf{0}$. Zusammengefasst erlauben diese Eigenschaften die Konstruktion einer physikalisch plausiblen, objektiven Schlupfrate $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} \in \mathbb{R}^2$. Für die weitere Behandlung der reibungsbehafteten Kontaktbedingungen ersetzt daher

$$\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} = \begin{Bmatrix} \tilde{v}_{\xi r} \\ \tilde{v}_{\eta r} \end{Bmatrix} = -\boldsymbol{\tau}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs} \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt} \mathbf{x}_t^{(2)} \right\}, \quad r \in \mathcal{S}, \quad (5.341)$$

den zu Beginn des Paragraphen in Gl. (5.334) angegebenen Ausdruck.

Zusammenfassung des semidiskreten Anfangswertproblems Zum Abschluss dieses Abschnitts zeigt Tabelle 5.9 eine Zusammenfassung der semidiskreten Gleichungsstruktur des in Abschnitt 3 im Rahmen finiter Deformationen dargestellten Kontaktproblems, bestehend aus der semidiskreten Bewegungsgleichung (5.342), einschließlich der diskreten Kontaktkräfte (5.320), der diskretisierten Form der Evolutionsgleichungen für die inneren Variablen (5.343) sowie den zuvor an jedem Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ aufgestellten Kontaktbedingungen (5.328) und (5.337) bzw. (5.328) und (5.338). Es ist festzuhalten, dass die Raumdiskretisierung der aus der Lagrange-Multiplikator-Methode resultierenden gemischten Variationsformulierung, siehe Gl. (4.48), auf ein semidiskretes Sattelpunktproblem in Abhängigkeit von den unbekannten Verschiebungen $\mathbf{u}^T = \{\mathbf{u}^{(1)T}, \mathbf{u}^{(2)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ (primale Variable) und deren Zeitableitungen, den inneren Variablen $\mathbf{q}^T = \{\mathbf{q}^{(1)T}, \mathbf{q}^{(2)T}\} \in \mathbb{R}^{n_Q}$, $n_Q = n_Q^{(1)} + n_Q^{(2)}$, sowie dem globalen Spaltenvektor für die Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{n_{us}}$ (duale Variable) führt. Neben den kontaktunabhängigen Termen

$$\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_{\text{int}}^{(1)}(\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{q}^{(1)}, t) \\ \mathbf{f}_{\text{int}}^{(2)}(\mathbf{u}^{(2)}, \mathbf{q}^{(2)}, t) \end{Bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{uu}} \quad \text{und} \quad \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_{\text{ext}}^{(1)}(\mathbf{u}^{(1)}, t) \\ \mathbf{f}_{\text{ext}}^{(2)}(\mathbf{u}^{(2)}, t) \end{Bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$$

Tabelle 5.9: Semidiskretes strukturdynamisches Algebro-Differentialgleichungssystem zur Behandlung eines unilateralen Kontaktproblems

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$, $\boldsymbol{\lambda}(t)$ und $\mathbf{q}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semidiskrete DAE-System	
$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{q}, t) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t),$	(5.342)
$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t),$	(5.343)
mit	
$\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{q}, t) = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) + \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}),$	(5.344)
den normalen Kontaktbedingungen	
$\tilde{g}_r \geq 0, \quad \lambda_{Nr} \geq 0, \quad \tilde{g}_r \lambda_{Nr} = 0 \quad \forall r \in \mathcal{S},$	(5.328)
den tangentialen Kontaktbedingungen für das Coulombsche Reibgesetz	
$f_{\tau r} = \ \boldsymbol{\lambda}_{Tr}\ + \mu_c \lambda_{Nr} ,$	
$\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} - \tilde{\gamma}_{\tau r} \boldsymbol{\lambda}_{Tr} = \mathbf{0}, \quad \tilde{\gamma}_{\tau r} \geq 0, \quad f_{\tau r} \leq 0, \quad \tilde{\gamma}_{\tau r} f_{\tau r} = 0 \quad \forall r \in \mathcal{S},$	(5.337)
bzw. den tangentialen Kontaktbedingungen für den reibungsfreien Fall	
$\boldsymbol{\lambda}_{Tr} = \boldsymbol{\tau}_r^T \boldsymbol{\lambda}_r = \mathbf{0} \quad \forall r \in \mathcal{S},$	(5.338)
sowie den Anfangsbedingungen	
$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{v}_0, \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$	
zu lösen.	

besteht der globale Kraftvektor

$$\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{q}, t) = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) + \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}} \quad (5.344)$$

aus dem in Gl. (5.320) definierten Kontaktkraftvektor $\mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$. Analoge Zusammenführungsoperationen die Anteile der diskretisierten, materiellen Körper $\mathcal{B}^{h(1)}$ und $\mathcal{B}^{h(2)}$ in globale Spaltenvektoren bzw. Matrizen aneinander fügen, gelten für die Massenmatrizen $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}$ und $\bar{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{up}}$ sowie für die mit dem gewöhnlichen ODE-System der inneren Variablen verzahnten Größen.⁹⁸

Im Vergleich zu dem in Tab. 5.3 spezifizierten rein strukturdynamischen System müssen jedoch zur Behandlung des gekoppelten dynamischen Interfaceproblems zusätzliche Barrieren beiseite geräumt werden. Zum einen verlangen die in Ungleichungsform vorliegenden Kontaktbedingungen (5.328) und (5.337) nach einer adäquaten Aktiven-Mengen-Strategie, siehe Abschnitt 5.5.5, als Teil des globalen Lösungsalgorithmus. Erst hierdurch lässt sich die Nichtlinearitätsressource in Gestalt der a priori unbekannten Separation in aktive und inaktive bzw. haftende und gleitende Kontaktzonen auflösen. Wie bereits durch die Abhängigkeiten im diskreten Kontaktkraftvektor (5.320) bzw. den kinematischen Größen \tilde{g}_r , siehe Gl. (5.324), und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$, siehe Gl. (5.341), angezeigt, müssen außerdem während des Deformationsprozesses die Kopplungsterme (5.312) und (5.313) sowie im Rahmen einer impliziten Zeitintegration die zugehörigen konsistenten Linearisierungsausdrücke fortlaufend aktualisiert werden.

Das weiterhin in der Zeit kontinuierliche DAE-System aus Tab. 5.9 wird in Abschnitt 5.6 im Rahmen der vertikalen Linienmethode der Zeitdiskretisierung unterzogen. Bevor jedoch eine nichtlineare, in der Zeit parametrisierte Gleichungsstruktur für das semidiskrete Kontaktproblem entwickelt werden kann, ist es erforderlich, die mortar-basierte Raumdiskretisierungsprozedur abzuschließen und die algorithmische Realisierung der Kopplungseinträge $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ aufzuzeigen. Wie in den vorhergehenden Paragraphen dargelegt, folgen aus diesen fundamentalen Integralausdrücken sämtliche für die Behandlung eines unilateralen Kontaktproblems notwendigen Größen. Zu diesem Zweck behandeln die Abschnitte 5.5.2 und 5.5.3 zunächst die numerische Auswertung der Kontaktintegrale (5.312) und (5.313). Hieran knüpft eine Darstellung zu den bislang noch nicht näher spezifizierten Ansatzfunktionen für die Lagrange-Multiplikatoren an. Den Abschluss zur erörterten Mortar-Kontaktformulierung bildet die Einführung einer effizienten Aktiven-Mengen-Strategie in Abschnitt 5.5.5, aus der ein nichtlineares, gleichheitsrestringiertes, semidiskretes Kontaktproblem hervorgeht.

5.5.2 Auswertung von Mortar-Integralen in 3D

Der Vergleich der beiden Kontaktintegralausdrücke (5.312) und (5.313) fördert einen wesentlichen Unterschied zu Tage. Im Gegensatz zu den Einträgen $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ $r \in \mathcal{S}$, $s \in \mathcal{S}$, der Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}}$ sind beim Aufstellen der Kopplungsgröße $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, $t \in \mathcal{M}$, der Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuM}}$ auch mit der Master-Oberfläche assoziierte Verschiebungsfreiheitsgrade beteiligt. Der Integrand für $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ $r \in \mathcal{S}$, $s \in \mathcal{S}$,

⁹⁸Wird der Körperindex i nicht mitgeführt, so beziehen sich die globalen Spaltenvektoren und Matrizen auf die gesamte Raumdiskretisierung.

enthält nur Größen, die auf der Slave-Seite ausgewertet werden, dort wo die eigentliche Integration ausgeführt wird. Im Gegensatz hierzu gestaltet sich die Berechnung der Komponenten $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ komplizierter, da das zu integrierende Produkt aus den master-seitigen Ansatzfunktionen $N_t^{(2)}$ für das virtuelle Verschiebungsfeld und den slave-seitigen Formfunktionen Ξ_r für das Lagrange-Multiplikatorfeld ebenfalls eine Auswertung auf $\gamma_c^{h(1)}$ verlangt. Wie bereits durch die Verkettungsoperation, siehe z. B. Gl. (5.311), angedeutet, bedarf es für dieses Vorhaben der Einführung einer diskreten Version der Abbildung $\chi_{\gamma_c}^h : \gamma_c^{h(1)} \times \mathbb{I} \rightarrow \gamma_c^{h(2)}$, um Knoten- und Integrationspunktkoordinaten zwischen Slave- und Master-Seite zu transformieren.

Das Ziel dieses Abschnittes ist es, eine dreidimensionale Kontaktdiskretisierungsstrategie wiederzugeben, die den slave-seitigen Integrationsbereich in sogenannte Mortar-Segmente unterteilt und hierdurch zugleich implizit eine diskrete Version der Transformationsabbildung $\chi_{\gamma_c}^h$ umsetzt. Darüber hinaus werden die Mortar-Segmente so gewählt, dass die Produkte der Ansatzfunktionen in den Gleichungen (5.312) und (5.313) innerhalb dieser Gebiete stetig differenzierbar sind und nicht aufgrund von Knicken in den Integranden die Genauigkeit des numerischen Quadraturverfahrens herabsetzen.

Obwohl theoretisch die globale Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}$ vollständig ohne Berücksichtigung von Unstetigkeiten in den Integranden durch eine elementweise ausgeführte numerische Quadratur auf $\gamma_c^{h(1)}$ berechnet werden kann, empfiehlt es sich, dasselbe Integrationsschema für die zwei Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}$ und $\hat{\mathbf{M}}$ heranzuziehen. Verschiedene Autoren, siehe z. B. Puso [2004], Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b] und Popp [2012], demonstrieren, dass solch eine Vorgehensweise die Erhaltung des Impulses für die semidiskrete Gleichungsstruktur garantiert. Infolge dieser Feststellung findet für die globale Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}$ dasselbe numerische Quadratur-Verfahren wie für $\hat{\mathbf{M}}$ auf Basis der Mortar-Segmente Anwendung.

Zur Generierung der stückweise stetigen Integrationsgebiete werden in den folgenden Paragraphen Projektionsregeln zwischen der Slave- und Master-Kontaktfläche spezifiziert, die ein kontinuierliches Normalenvektorfeld voraussetzen.

Bestimmung eines kontinuierlichen Normalenfeldes in 3D In Anlehnung an Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b] und Weißenfels und Wriggers [2015] wird zur Durchführung der Projektionsoperationen ein kontinuierliches \mathcal{C}^0 -stetiges Normalenvektorfeld auf der diskretisierten Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ konstruiert, siehe Abb. 5.7. Die Berechnungsvorschrift für einen knotenweise gemittelten Einheitsnormalenvektor im Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ lautet

$$\mathbf{n}_s = \frac{\hat{\mathbf{n}}_s}{\|\hat{\mathbf{n}}_s\|}, \quad \text{mit} \quad \hat{\mathbf{n}}_s = \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}. \quad (5.345)$$

Die Umsetzung der Gl. (5.345) erfordert zunächst die Bestimmung der nach außen gerichteten Normalen

$$\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|} = \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|} \times \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\eta s}^{|\tilde{e}|}, \quad \tilde{e} = 1, \dots, n_s^{\text{adj}}, \quad (5.346)$$

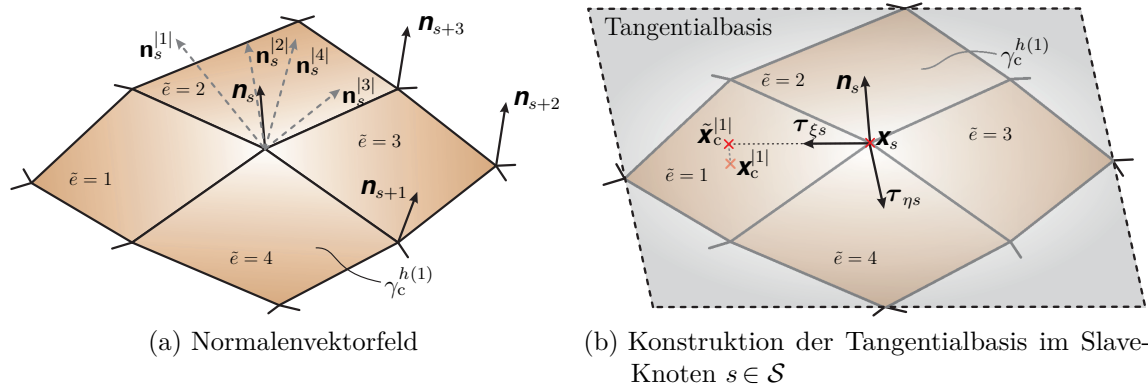


Abbildung 5.7: Konstruktion eines auf der Slave-Seite $\gamma_c^{h(1)}$ errichteten, kontinuierlichen Normalenvektorfelds in 3D

der im Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ angrenzenden Elemente \tilde{e} , $\tilde{e} = 1, \dots, n_s^{\text{adj}}$.⁹⁹ Die Anzahl der in $s \in \mathcal{S}$ benachbarten Elemente ist durch n_s^{adj} festgelegt. Weiterhin sind die in Gl. (5.346) verwendeten Tangentenvektoren für ein Nachbarelement \tilde{e} definiert als¹⁰⁰

$$\hat{\tau}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|} = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\xi_s^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)} \quad \text{und} \quad \hat{\tau}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|} = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\eta}^{(1)}(\xi_s^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)}, \quad (5.347)$$

mit der für das jeweilige Nachbarelement des globalen Slave-Knotens $s \in \mathcal{S}$ anzupassenden lokalen Koordinate $\xi_s^{(1)} = \{\xi_s^{(1)}, \eta_s^{(1)}\}^T \in \mathbb{R}^2$. Neben dem hier dargestellten Ansatz existieren einige Modifikationen. So wird in der zuerst von Yang et al. [2005] vorgeschlagenen Definition eines kontinuierlichen Normalenvektorfeldes eine zusätzliche Gewichtung basierend auf Längen (2D) bzw. Flächenmaßen (3D) der in $s \in \mathcal{S}$ zusammenstoßenden Elemente bei der Mittelung der Normalen eingebracht, siehe hierzu auch [Jin et al., 2005; Linhard, 2009; Cichosz und Bischoff, 2011; Ubach et al., 2013; Hammer, 2013; Neto et al., 2017]. Ein auf [Popp et al., 2010] zurückgehender Ansatz lässt jegliche Gewichtung außer Acht und verwendet normierte, elementbezogene Einheitsnormalenvektoren $\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}$, $\|\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}\| = 1$, zur Berechnung von \mathbf{n}_s . Da in dieser Arbeit im Wesentlichen von regelmäßigen FE-Netzen ausgegangen wird, kann auf entsprechende Anpassungen verzichtet werden.

Analog zu den Ausdrücken (5.296) und (5.298) lässt sich das C^0 -stetige Normalenvek-

⁹⁹Zur Unterscheidung diskontinuierlicher, lokaler Knotengrößen der im Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ angrenzenden Elemente \tilde{e} , $\tilde{e} = 1, \dots, n_s^{\text{adj}}$, wird ein hochgestellter Index in der Form $(\cdot)^{|\tilde{e}|}$ verwendet. Im Gegensatz zu den bisher verwendeten globalen Elementindizes markiert \tilde{e} lediglich einen lokalen Index, dessen Zählung vom globalen Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ abhängt.

¹⁰⁰Streng genommen müssen die lokalen Vektoren $\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}$, $\hat{\tau}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|}$ und $\hat{\tau}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|}$ auf Elementebene definiert werden. Dies impliziert, dass innerhalb jedes Elements $|\tilde{e}|$, $\tilde{e} = 1, \dots, n_s^{\text{adj}}$, der globale Knotenindex s einem lokalen Knoten a aus dem Satz $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ zugeordnet werden muss. Um die Einführung zusätzlicher Koinzidenzstrukturen, wie z. B. eines Identifikationsfeldes, siehe [Hughes, 2000], zu vermeiden, wird daher eine leichte Inkonsistenz zwischen globaler und lokaler Ebene in Kauf genommen.

torfeld mit Hilfe der Standardansatzfunktionen $N_s^{(1)}(\mathbf{x}^{h(1)})$, $s \in \mathcal{S}$, durch

$$\mathbf{n}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t) \Big|_{\gamma_c^{h(1)}} = \sum_{s \in \mathcal{S}} N_s^{(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}) \mathbf{n}_s(\mathbf{x}^{h(1)}, t) \quad (5.348)$$

interpolieren. Die durch Gl. (5.348) eingebrachte Glättung dient dazu, unphysikalische Diskontinuitäten des Normalenvektorfeldes in den Knotenpositionen auszugleichen. Als Ursache hierfür können oft grobe Vernetzungen von gekrümmten Oberflächen mit finiten Elementen niedriger Ordnung angesehen werden. Insbesondere gilt es, die hierdurch in den Kontaktkräften induzierten Oszillationen bei traditionellen Kontaktdiskretisierungsstrategien, wie z. B. bei unmodifizierten NTS-Algorithmen, zu vermeiden. Im Gegensatz zur Glättung von diskretisierten Oberflächen, siehe [Padmanabhan und Laursen, 2001; Wriggers et al., 2001; Krstulovic-Opara et al., 2002; Stadler et al., 2003; Puso und Laursen, 2002; Puso, 2004; Neto et al., 2017], modifiziert der angegebene Ansatz nicht die eigentliche Flächengeometrie. Mit der Mittelungsprozedur werden jedoch vergleichbare Normalenvektorfelder generiert wie sie aus einer \mathcal{C}^1 -kontinuierlichen Oberflächenbeschreibung resultieren würden.

Bezugnehmend auf Abschnitt 3.1 soll in der Tangentialebene an dem Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ eine zu \mathbf{n}_s orthogonal ausgerichtete Basis (Tangentialbasis) von orthonormierten Tangentenvektoren, $\boldsymbol{\tau}_{\xi s}$ und $\boldsymbol{\tau}_{\eta s}$, errichtet werden. An solch eine in $s \in \mathcal{S}$ zu konstruierende Tangentialbasis werden die folgenden Forderungen

$$\boldsymbol{\tau}_{\eta s} = \mathbf{n}_s \times \boldsymbol{\tau}_{\xi s}, \quad \mathbf{n}_s^T \boldsymbol{\tau}_{\xi s} = 0, \quad \mathbf{n}_s^T \boldsymbol{\tau}_{\eta s} = 0 \quad (5.349)$$

gestellt. Geschuldet dem Umstand, dass der Rotationsfreiheitsgrad der Tangentialbasis um die \mathbf{n}_s -Achse durch Gl. (5.349) nicht adressiert wird, reichen die in Summe vorliegenden fünf skalaren Gleichungen nicht zur eindeutigen Bestimmung der beiden Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}_{\xi s}$ und $\boldsymbol{\tau}_{\eta s}$ aus. Aus diesem Grund muss eine zusätzliche Bedingung zur Fixierung der Tangentialbasis herangezogen werden, deren Spezifikation jedoch beliebig ist.¹⁰¹ Die Wahl fällt dabei auf die in Abb. 5.7b dargestellte Vorgehensweise. Ausgehend von der in \mathbf{x}_s , $s \in \mathcal{S}$, konstruierten Tangentialebene wird das geometrische Zentrum

$$\mathbf{x}_c^{[1]} = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_0^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)}, \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\xi}_0^{(1)} = \{\xi_0^{(1)}, \eta_0^{(1)}\}^T = \mathbf{0}, \quad (5.350)$$

des ersten im Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ angrenzenden Elements, d. h. $\tilde{e} = 1$, in die Ebene projiziert:

$$\tilde{\mathbf{x}}_c^{[1]} = \mathbf{x}_c^{[1]} - \left(\left\{ \mathbf{x}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s \right\}^T \mathbf{n}_s \right) \mathbf{n}_s \quad (5.351)$$

Auf Basis des Differenzvektors $\tilde{\mathbf{x}}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s$, gebildet aus dem projizierten Punkt $\tilde{\mathbf{x}}_c^{[1]}$ und

¹⁰¹Die naheliegende Wahl einer zu Gl. (5.345) analogen Berechnungsvorschrift für den Tangentialvektor $\boldsymbol{\tau}_{\xi s}$, d. h. $\boldsymbol{\tau}_{\xi s} = \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|} / \left\| \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|} \right\|$, eignet sich aufgrund der Verletzung der Orthogonalitätsbedingung (5.349)₂ nicht. Im allgemeinen Fall gilt $\mathbf{n}_s^T \boldsymbol{\tau}_{\xi s} \neq 0$.

dem Knotenortsvektor \mathbf{x}_s , kann nun der erste Tangentialvektor abgeleitet werden:¹⁰²

$$\boldsymbol{\tau}_{\xi s} = \frac{\tilde{\mathbf{x}}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s}{\|\tilde{\mathbf{x}}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s\|} = \frac{[\mathbf{I} - [\mathbf{n}_s \mathbf{n}_s^T]] \{\mathbf{x}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s\}}{\|[\mathbf{I} - [\mathbf{n}_s \mathbf{n}_s^T]] \{\mathbf{x}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s\}\|} \quad (5.352)$$

Die Bestimmung des verbleibenden Vektors $\boldsymbol{\tau}_{\eta s}$ erfolgt gemäß Gl. (5.349)₁.¹⁰³ Unter Beachtung der Definition (5.306) für $\boldsymbol{\tau}_r \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ lautet eine entsprechende Interpolation der kompletten Tangentialbasis

$$\boldsymbol{\tau}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)|_{\gamma_c^{h(1)}} = \left[\boldsymbol{\tau}_\xi^h|_{\gamma_c^{h(1)}}, \boldsymbol{\tau}_\eta^h|_{\gamma_c^{h(1)}} \right] = \sum_{s \in \mathcal{S}} N_s^{(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}) \boldsymbol{\tau}_s(\mathbf{x}^{h(1)}, t) \in \mathbb{R}^{3 \times 2}. \quad (5.353)$$

Clipping Mit dem vorbereitenden Schritt der Definition des kontinuierlichen Normalenvektorfeldes können nun die eigentlichen Mortar-Segmente, auf denen die numerische Integration stattfindet, aufgestellt sowie die hierfür benötigten Projektionsregeln angegeben werden. Unglücklicherweise ist aufgrund des zumeist gegenwärtigen Elementverzugs¹⁰⁴ eine direkte Projektion der Master-Facetten auf die gegenüberliegende slave-seitige Oberflächendiskretisierung nicht einfach zu realisieren. Daher wurde von Puso [2004] ein Kopplungsschema entwickelt, welches die eigentliche Integration nicht auf $\gamma_c^{h(1)}$ ausführt, sondern auf einer geometrischen Approximation¹⁰⁵ von stückweise ebenen Segmenten. Diese als Mortar-Segmente bezeichneten Gebiete auf denen die Integranden der Gleichungen (5.312) und (5.313) \mathcal{C}^1 -stetig sind, entsprechen beliebig geformten Polygonen im dreidimensionalen Fall,¹⁰⁶ gegenüber den in Abschnitt 5.5.3 vorgestellten Liniensegmenten

¹⁰²Es sei angemerkt, dass die dargestellte Vorgehensweise für Mittelknoten von 9-knotigen Viereck-Elementen aufgrund des degenerierten Differenzvektors, $\tilde{\mathbf{x}}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s = \mathbf{0}$, nicht anwendbar ist. Da $n_s^{\text{adj}} = 1$ gilt, wird für diesen Sonderfall ohne die Orthogonalitätsbedingung (5.349)₂ zu verletzen, die Berechnungsvorschrift für den Tangentialvektor $\boldsymbol{\tau}_{\xi s}$ zu $\boldsymbol{\tau}_{\xi s} = \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{[1]} / \|\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{[1]}\|$ angepasst.

¹⁰³Einige Autoren, wie z. B. Weißenfels und Wriggers [2015], konstruieren die Basis, bestehend aus $\boldsymbol{\tau}_{\xi s}$, $\boldsymbol{\tau}_{\eta s}$ und \mathbf{n}_s , in einer vergleichbaren Art und Weise, jedoch in einer anderen Reihenfolge. Am Beginn dieser Prozedur stehen jetzt die gemittelten Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}_{\xi s} = \left(\sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|} \right) / \left(\sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|} \right)$ und $\boldsymbol{\tau}_{\eta s} = \left(\sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\eta s}^{|\tilde{e}|} \right) / \left(\sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\eta s}^{|\tilde{e}|} \right)$, dessen normiertes Kreuzprodukt den Normalenvektor $\mathbf{n}_s = \left(\boldsymbol{\tau}_{\xi s} \times \boldsymbol{\tau}_{\eta s} \right) / \left(\boldsymbol{\tau}_{\xi s} \times \boldsymbol{\tau}_{\eta s} \right)$ liefert. Es ist leicht einzusehen, dass das generierte Dreibein nur für wenige Spezialfälle eine orthogonale Basis bildet, wodurch der Grad der Komplexität für die aufzustellenden Kontaktausdrücke erheblich zunimmt. Darüber hinaus muss im Rahmen einer solchen Implementation sichergestellt werden, dass die lokalen Koordinatensysteme der in $s \in \mathcal{S}$ angrenzenden Elemente die gleiche Orientierung aufweisen.

¹⁰⁴Ein Indikator für den Gestaltverzug bzw. die Verwölbung eines Oberflächenelementes in 3D ist die Formabweichung der Facettengeometrie im Vergleich zu einer Ebene mit einem gemittelten Elementnormalenvektor. Bei Betrachtung der Gleichungen (5.346) und (5.347) wird deutlich, dass der Normalenvektor innerhalb des Elementgebiets stetig variieren kann und so die Elementfacette nur für wenige Spezialfälle vollständig in einer glatten Ebene liegt. Quadratische Elemente zeichnen sich zudem meist durch eine gekrümmte Oberfläche aus, sodass der Gestaltverzug sofort einsichtig ist.

¹⁰⁵Die in dieser Arbeit beschriebene mortar-basierte Diskretisierungsstrategie für den dreidimensionalen Fall kann auch als das Einführen einer virtuellen Zwischenschicht interpretiert werden.

¹⁰⁶In Verbindung mit den in dieser Arbeit verwendeten Oberflächenelementen, siehe Abb. B.1, entsprechen die Kontakt-Segmente drei- bis achteckigen Überschneidungspolygonen.

im 2D-Fall. Die Hauptschritte der Kopplungsstrategie, das sogenannte Clipping, werden für ein Elementpaar (e_S, e_M) bestehend aus einem Slave-Element $e_S = 1, \dots, n_c^{e(1)}$ und einer Master-Elementfacette $e_M = 1, \dots, n_c^{e(2)}$, die an möglichen Kontaktinteraktionen untereinander beteiligt sind, in den Abbildungen 5.8 und 5.9 veranschaulicht. Die potentielle Detektierung der Überlappung des Elementpaares folgt aus der globalen Kontaktsuche, siehe hierzu Abschnitt 5.8. Die zugehörigen Erläuterungen zu den einzelnen Schritten des Algorithmus fasst die Auflistung 5.1 zusammen. Für weiterführende Informationen zu diesem weit verbreiteten auf der Mortar-Projektionsmethode basierenden, numerischen Integrationsschema in diversen Variationen sei auf [Puso und Laursen, 2003; Puso, 2004; Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b; Puso et al., 2008; Popp et al., 2010; Hesch und Betsch, 2011c; Popp, 2012; Gitterle, 2012; Weißenfels, 2012; Laursen et al., 2012; Franke, 2014; Farah et al., 2015] verwiesen.

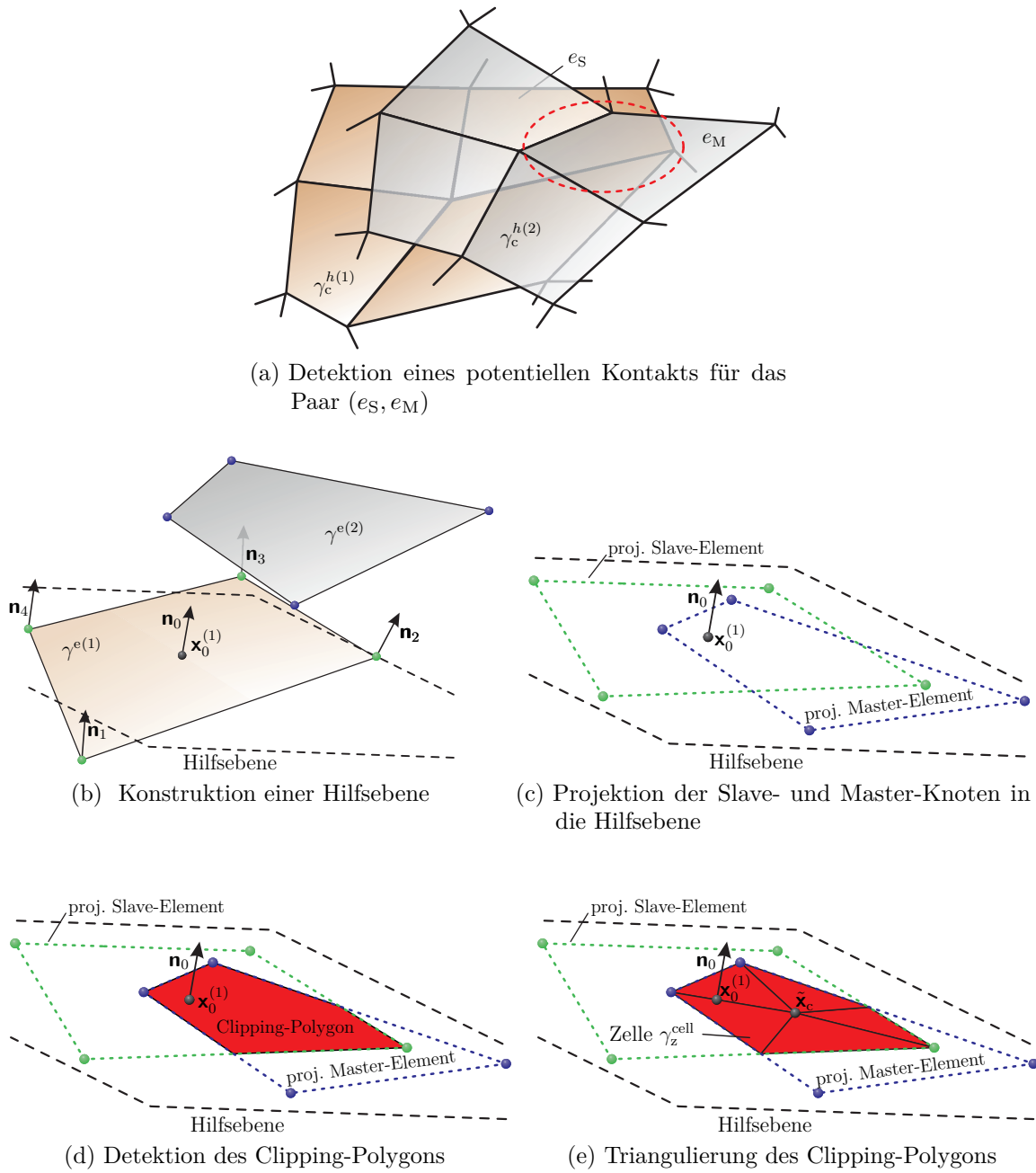


Abbildung 5.8: Mortar-basierte-Kopplungsstrategie in 3D für ein Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) und einem mit 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8) diskretisierten Kontakt-Interface

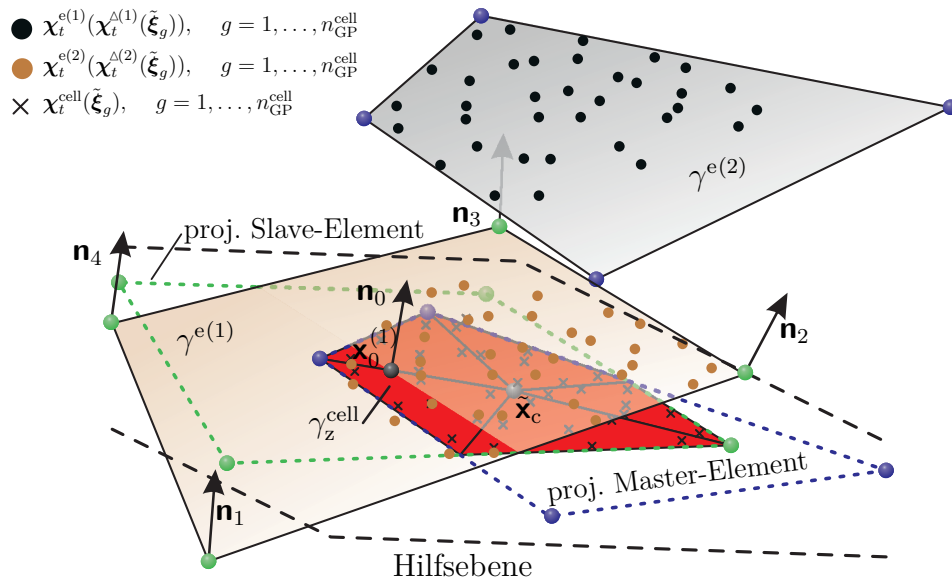


Abbildung 5.9: Numerische Integrationsprozedur basierend auf einer Triangulierung von Mortar-Segmenten sowie Rückprojektionsoperationen auf Slave- und Master-Element, e_S und e_M , am Beispiel eines mit 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8) diskretisierten Kontakt-Interface

Algorithmus 5.1:

1. Aus dem geometrischen Zentrum

$$\mathbf{x}_0^{(1)} = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_0^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)}, \quad \text{mit} \quad \xi_0^{(1)} = \{\xi_0^{(1)}, \eta_0^{(1)}\}^T = \mathbf{0}, \quad (5.354)$$

und dem zugehörigen Normalenvektor

$$\mathbf{n}_0 = \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_0^{(1)}) \mathbf{n}_a \right\} / \left(\left\| \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_0^{(1)}) \mathbf{n}_a \right\| \right) \quad (5.355)$$

für das Slave-Element e_S wird eine Hilfsebene konstruiert, siehe Abb. 5.8b.

2. Zur Entfernung der Elementverwölbung von e_S sind alle zugehörigen Knoten des Slave-Elements $\mathbf{x}_a^{e(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, entlang \mathbf{n}_0 auf die Hilfsebene zu projizieren, siehe Abb. 5.8c. Hieraus resultieren die projizierten Koordinaten

$$\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(1)} = \mathbf{x}_a^{e(1)} - \left(\left\{ \mathbf{x}_a^{e(1)} - \mathbf{x}_0^{(1)} \right\}^T \mathbf{n}_0 \right) \mathbf{n}_0, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}. \quad (5.356)$$

3. Zur Entfernung der Elementverwölbung von e_M sind alle zugehörigen Knoten des Master-Elements $\mathbf{x}_a^{e(2)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}$ entlang \mathbf{n}_0 auf die Hilfsebene zu projizieren, siehe Abb. 5.8c. Hieraus resultieren die projizierten Koordinaten

$$\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(2)} = \mathbf{x}_a^{e(2)} - \left(\left\{ \mathbf{x}_a^{e(2)} - \mathbf{x}_0^{(1)} \right\}^T \mathbf{n}_0 \right) \mathbf{n}_0, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}. \quad (5.357)$$

4. Zur Detektion des Überschneidungspolygons (Clipping-Polygon) mit n_{cell} Ecken, die sich an den Positionen $\tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}$, $z = 1, \dots, n_{\text{cell}}$, befinden, wird ein Clipping-Algorithmus herangezogen. Abb. 5.8d illustriert das Resultat dieses Schritts. Weitere technische Details zum angewendeten Clipping-Algorithmus sind Anhang C.2 zu entnehmen.
5. Für das aus Slave- und Master-Element, e_S und e_M , gebildete Polygon wird dessen geometrisches Zentrum $\tilde{\mathbf{x}}_c$ durch arithmetische Mittelwertbildung lokalisiert:

$$\tilde{\mathbf{x}}_c = \frac{1}{n_{\text{cell}}} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}} \quad (5.358)$$

Ausgehend von dem Ankerpunkt $\tilde{\mathbf{x}}_c$ wird das Überschneidungspolygon in n_{cell} dreieckförmige Integrationszellen, siehe Abb. C.3 im Anhang C.2 für weitere technische Details, unterteilt.¹⁰⁷ Jedes Dreieck wird durch seine Ecken $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$, $\mu = 1, \dots, 3$, und die innerhalb des Referenzgebiets der Integrationszelle Ω_Δ in Abhängigkeit der lokalen Koordinaten

$$\tilde{\boldsymbol{\xi}} = \{ \{ \tilde{\xi}, \tilde{\eta} \}^T \mid \tilde{\xi} \geq 0, \tilde{\eta} \geq 0, \tilde{\xi} + \tilde{\eta} \leq 1 \} \in \Omega_\Delta \quad (5.359)$$

definierten Standardansatzfunktionen $N_\mu^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}})$, $\mu = 1, \dots, 3$,¹⁰⁸ als

$$\tilde{\mathbf{x}}^{\text{cell}} = \boldsymbol{\chi}_t^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) = \sum_{\mu=1}^3 N_\mu^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) \tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} \quad (5.360)$$

parametrisiert. Abb. 5.8e veranschaulicht den beschriebenen Prozedurschritt schematisch.

6. Zur Verteilung der $n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$ Gauß-Punkte $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g = \{ \tilde{\xi}_g, \tilde{\eta}_g \}^T \in \mathbb{R}^2$ und zur Definition der Wichtungsfaktoren \tilde{w}_g , $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, innerhalb des Referenzgebiets der Integrationszellen Ω_Δ kommen Integrationsregeln vom Gauß-Typ zum Einsatz. Die an einem Gauß-Punkt der Zelle $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, ausgewertete Koordinate $\tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}} = \boldsymbol{\chi}_t^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g)$ wird entlang \mathbf{n}_0 zurück auf das Slave-Element e_S gemäß der impliziten Vorschrift

$$\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)} - d_g^{(1)} \mathbf{n}_0 - \tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}} = 0 \quad (5.361)$$

projiziert. Im nächsten Schritt wird die Lösung des aus drei gekoppelten nichtlinearen Gleichungen in Abhängigkeit von $d_g^{(1)}$ und $\boldsymbol{\xi}_g^{(1)} = \{ \xi_g^{(1)}, \eta_g^{(1)} \}^T = \boldsymbol{\chi}_t^{\Delta(1)}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \in \mathbb{R}^2$ bestehenden minimalen Distanzproblems (5.361) ermittelt, wodurch nun alle zur

¹⁰⁷Alternativ zu dem von Puso und Laursen [2004a] und Puso und Laursen [2004b] vorgeschlagenen Ansatz (5.358) kann auch eine Delaunay-Triangulierung zum Einsatz kommen, siehe hierzu exemplarisch [Hesch und Betsch, 2011c; Popp, 2012; Farah et al., 2015]. In [Popp et al., 2010] wird vorgeschlagen, in die Berechnung des Polygonzentrums (5.358) Flächenschwerpunktüberlegungen einfließen zu lassen, was verständlicherweise einen erhöhten Aufwand in der Linearisierung nach sich zieht.

¹⁰⁸Die Standardansatzfunktionen $N_\mu^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}})$, $\mu = 1, \dots, 3$, auf dem dreieckförmigen Referenzgebiet Ω_Δ sind gemäß Gl. (B.10) in Tab. B.1 definiert als $N_1^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) = 1 - \tilde{\xi} - \tilde{\eta}$ und $N_2^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) = \tilde{\xi}$, $N_3^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}) = \tilde{\eta}$.

Abwicklung der slave-seitigen numerischen Integration benötigen Größen zur Verfügung stehen. Eine absolut identische Verfahrensweise wird zur Initiierung der numerischen Quadratur auf dem Master-Element e_M angewendet. Die an einem Gauß-Punkt der Zelle $\tilde{\xi}_g$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, ausgewertete Koordinate $\tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}} = \chi_t^{\text{cell}}(\tilde{\xi}_g)$ wird entlang \mathbf{n}_0 zurück auf das Master-Element e_M gemäß der impliziten Abbildungsvorschrift

$$\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(2)}} N_a^{(2)}(\xi_g^{(2)}) \mathbf{x}_a^{\text{e}(2)} - d_g^{(2)} \mathbf{n}_0 - \tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}} = 0 \quad (5.362)$$

projiziert. Im nächsten Schritt wird die Lösung des aus drei gekoppelten nichtlinearen Gleichungen in Abhängigkeit von $d_g^{(2)}$ und $\xi_g^{(2)} = \{\xi_g^{(2)}, \eta_g^{(2)}\}^T = \chi_t^{\Delta(2)}(\tilde{\xi}_g) \in \mathbb{R}^2$ bestehenden minimalen Distanzproblems (5.362) ermittelt,¹⁰⁹ wodurch nun alle zur Abwicklung der master-seitigen numerischen Integration benötigten Größen bereitstehen.¹¹⁰ Abb. 5.9 visualisiert den beschriebenen Vorgang zum Durchführen der segmentbasierten numerischen Integration grafisch.

Zur Illustration der verschiedenen verwendeten Transformationsebenen zeigt Abb. 5.10 diverse durch den dreidimensionalen Mortar-Kopplungsalgorithmus 5.1 implizit umgesetzte Koordinatentransformationen. Darüber hinaus setzt die beschriebene Segmentierungsprozedur inhärent voraus, dass der Gestaltverzug (die Verwölbung) der zu projizierenden Oberflächenelemente nur in moderaten Grenzen variiert. Wird diese Annahme verletzt, kann zu einigen der in den Integrationszellen platzierten Quadraturpunkten nicht die dazugehörige lokale Koordinate auf den Elementfacetten bestimmt werden. In diesen Fällen ist zu den Projektionsvorschriften (5.361) und (5.362) keine konvergente Lösung auffindbar oder die isoparametrische Koordinate liegt außerhalb des zulässigen Elementgebiets. Aus diesem Grund eignet sich der beschriebene, dreidimensionale Mortar-Kopplungsalgorithmus 5.1 nur für Oberflächendiskretisierungen mit linearen Ansatzfunktionen. Eine Erweiterung für quadratische Elemente wird in einem der folgenden Paragraphen vorgestellt. Für weitere algorithmische Details und eine tiefergehende

¹⁰⁹Zur Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme (5.361) und (5.362) empfiehlt sich die Verwendung eines lokalen Newton-Raphson-Verfahrens. Lediglich eine Diskretisierung der Kontaktschnittstelle mit 3-knotigen linearen Dreieck-Elementen (Tri3) erfordert nur die Lösung eines linearen Gleichungssystems.

¹¹⁰Aus den angegebenen impliziten Vorschriften (5.361) und (5.362) resultieren die Transformationen $\chi_t^{\Delta(1)} : \Omega_{\Delta} \rightarrow \Omega_{\square}^{(1)}$ und $\chi_t^{\Delta(2)} : \Omega_{\Delta} \rightarrow \Omega_{\square}^{(2)}$, siehe Abb. 5.10. Die Umsetzung der Abbildungsoperatoren $\chi_t^{\Delta(1)}$ und $\chi_t^{\Delta(2)}$ erfolgt jedoch nur in diskreter Form, mit dem Ziel das Produkt der Ansatzfunktionen (5.312) an $\xi_g^{(1)} = \chi_t^{\Delta(1)}(\tilde{\xi}_g)$ bzw. das Produkt der Ansatzfunktionen (5.313) an $\xi_g^{(1)} = \chi_t^{\Delta(1)}(\tilde{\xi}_g)$ und $\xi_g^{(2)} = \chi_t^{\Delta(2)}(\tilde{\xi}_g)$ für die Quadraturpunkte in den Integrationszellen $\tilde{\xi}_g$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, auszuwerten. Es sei angemerkt, dass [Puso und Laursen, 2004b; Puso und Laursen, 2004a; Puso et al., 2008] die Berechnungsvorschriften für $\chi_t^{\Delta(i)}$, $i = 1, 2$, durch den impliziten Ausdruck

$$\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(i)}} N_a^{(i)}(\xi_g^{(i)}) \tilde{\mathbf{x}}_a^{\text{e}(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}} = \mathbf{0}, \quad i = 1, 2,$$

generieren.

mathematische Behandlung sowie die Aufzählung zusätzlicher, notwendiger Voraussetzungen¹¹¹ für eine erfolgreiche Clipping-Operation sei auf die Originalarbeit von Puso [2004] verwiesen.

¹¹¹Wie Puso [2004] darlegt, ist ein wesentlicher Bestandteil des Algorithmus 5.1 die vorausgesetzte Konvexität des Überschneidungspolygons. Nur für diesen Fall ist das geometrische Zentrum $\tilde{\mathbf{x}}_c$ im Polygonebiet lokalisierbar und eine Triangulierung durchführbar.

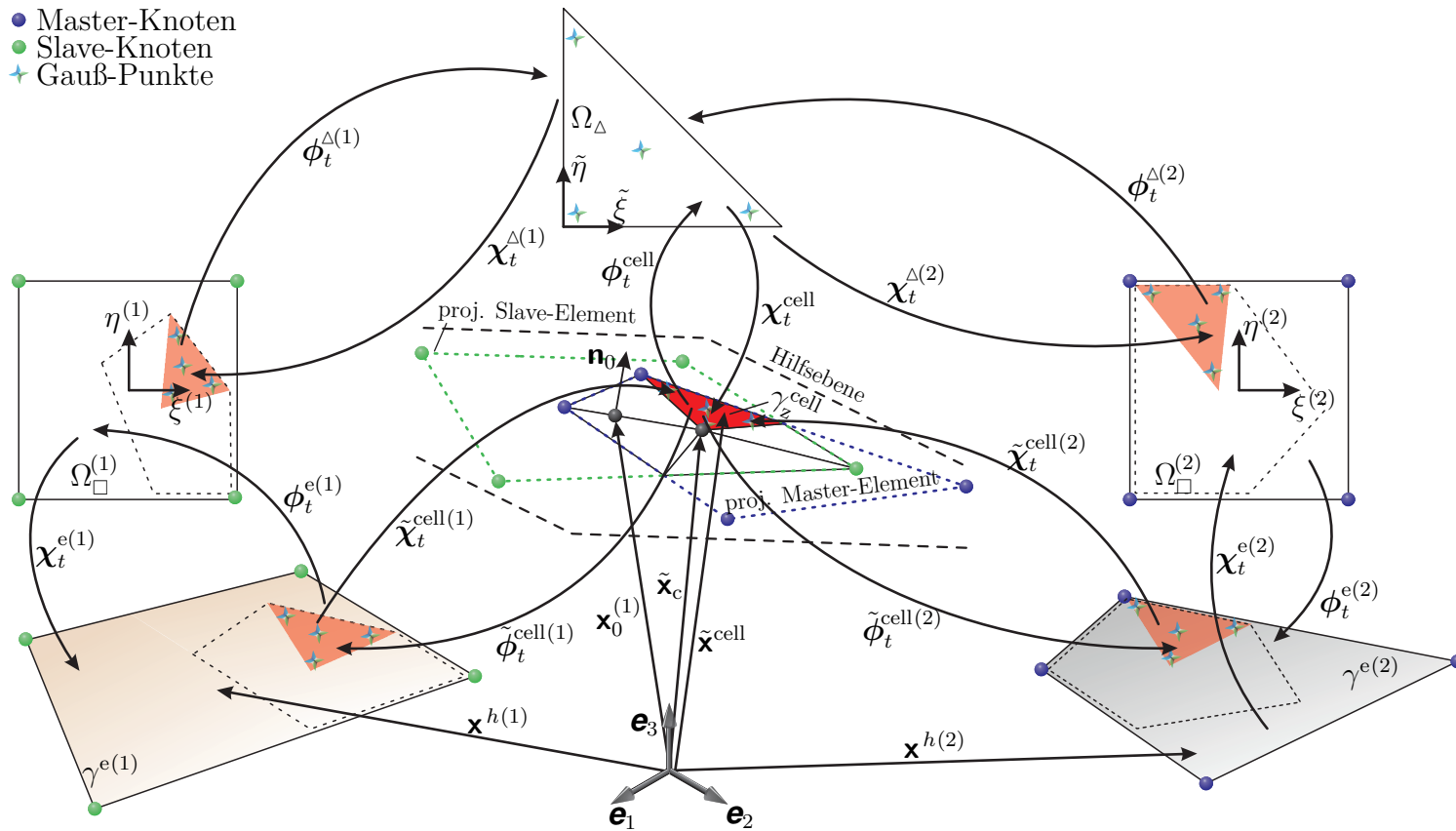


Abbildung 5.10: Induzierte Koordinatentransformationen der mortar-basierten Interface-Segmentierung für ein Elementpaar (e_S, e_M)

Anwendung der mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie Wie schon in Kap. 3 angemerkt, repräsentieren der in $n_c^{e(1)}$ Oberflächenelemente unterteilte, slave-seitige Kontaktrand $\gamma_c^{h(1)} = \bigcup_{e=1}^{n_c^{e(1)}} \gamma^{e(1)}$ und der in $n_c^{e(2)}$ Oberflächenfacetten, zerlegte master-seitige Kontaktrand $\gamma_c^{h(2)} = \bigcup_{e=1}^{n_c^{e(2)}} \gamma^{e(2)}$ a priori abgegrenzte Teilgebiete auf der jeweiligen Berandung, auf dem alle potentiellen Kontakttereignisse stattfinden. Die Ansammlung sämtlicher Slave-Master-Elementpaare $(e_S, e_M) \in \mathcal{E}_c$, mit $e_S \in \mathcal{E}_S$, $\mathcal{E}_S = \{1, \dots, n_c^{e(1)}\}$, $e_M \in \mathcal{E}_M$, $\mathcal{E}_M = \{1, \dots, n_c^{e(2)}\}$, $\mathcal{E}_c \subseteq \mathcal{E}_S \times \mathcal{E}_M = \{(e_S, e_M) \mid e_S \in \mathcal{E}_S, e_M \in \mathcal{E}_M\}$, deren Detektion mittels der globalen Kontaktsuche,¹¹² siehe Abschnitt 5.8, und dem Mortar-Projektionsalgorithmus 5.1 erfolgt, kennzeichnet dagegen auf den gegenüberliegenden Kopplungsflächen die zu jedem betrachteten Zeitpunkt aktuell involvierten Kontaktzonen,

$$\tilde{\gamma}_c^{h(1)} = \bigcup_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \tilde{\gamma}^{e(1)} \subseteq \gamma_c^{h(1)} \quad \text{und} \quad \tilde{\gamma}_c^{h(2)} = \bigcup_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(2)}} \tilde{\gamma}^{e(2)} \subseteq \gamma_c^{h(2)}, \quad (5.363)$$

mit $\tilde{n}_c^{e(1)} \leq n_c^{e(1)}$ und $\tilde{n}_c^{e(2)} \leq n_c^{e(2)}$. Nur nach erfolgreichem Passieren beider Suchphasen ohne Verwerfung wird das Elementpaar (e_S, e_M) in die Menge \mathcal{E}_c aufgenommen sowie das hieraus gebildete Mortar-Segment akzeptiert.^{113,114}

Weiterhin ist hervorzuheben, dass die zugehörigen Flächen der lokalisierten Slave- und Master-Elemente, $\tilde{\gamma}^{e(1)}$ und $\tilde{\gamma}^{e(2)}$, nicht vollständig an den Kontaktinteraktionen teilnehmen müssen. Folglich gehen in die Gebietszerlegungen (5.363)₁ und (5.363)₂ nur die tatsächlich überdeckten Anteile einer jeden Facette ein, d. h. $\tilde{\gamma}^{e(1)} \subseteq \gamma^{e(1)}$ und $\tilde{\gamma}^{e(2)} \subseteq \gamma^{e(2)}$. Damit muss beispielsweise das durch die $\tilde{n}_c^{e(1)}$ beteiligten slave-seitigen Elementgebiete $\tilde{\gamma}^{e(1)}$, $e = 1, \dots, \tilde{n}_c^{e(1)}$, aggregierte physikalische Gebiet $\tilde{\gamma}_c^{h(1)}$ nicht mehr notwendigerweise $\gamma_c^{h(1)}$ komplett ausfüllen. Identische Aussagen gelten für die Master-Seite. Darüber hinaus wird die numerische Integration zur Auswertung der Kontaktintegrale (5.312) und (5.313) im Rahmen der hier vorgestellten mortar-basierten Finite-Elemente-Methode nicht länger

¹¹²Innerhalb der globalen Kontaktsuche wird eine Vorauswahl basierend auf rein geometrischen Gesichtspunkten und einer groben bzw. approximativen Beschreibung der Kontaktschnittstellengeometrie, die einfache Kollisionsvorhersagen ermöglicht, vorgenommen. Das Ziel des in der vorliegenden Arbeit verwendeten globalen Suchalgorithmus ist es, sämtliche potentiell überlappenden Slave-Master-Elementpaare zu detektieren. Durch die Abarbeitung einer hierarchischen Suchstruktur, in der kleinere Subobjekte wie Elemente in größeren Hüllkörpern zusammengefasst werden, müssen nicht sämtliche Kombinationen (e_S, e_M) aus der Menge der geordneten Paare $\mathcal{E}_S \times \mathcal{E}_M$ gegeneinander auf Kollision getestet werden. Liegt kein potentieller Kontakt zwischen slave- und master-seitigen Hüllkörperformen höherer Hierarchieebenen vor, können alle hierin enthaltenen Kombinationen von Elementpaaren bereits vorab verworfen werden. Für weitere Details zur globalen Kontaktsuche sei auf Abschnitt 5.8 verwiesen.

¹¹³Nachdem für das Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) durch die globale Suche eine potentielle Überlappung festgestellt wurde, durchläuft das Facettenpaar (e_S, e_M) im nächsten Schritt eine lokale Kontaktdetektionsphase. Letztere geschieht mittels dem Mortar-Projektionsalgorithmus 5.1, welcher z. B. bei einem misslungenen Versuch für das Aufstellen des Mortar-Segments bzw. des Überschneidungspolygons zu einer Verwerfung von (e_S, e_M) führt. Das Auftreten einer Kontaktinteraktion zwischen e_S und e_M ist damit ausgeschlossen. Nur nach erfolgreicher Berechnung der zur Auswertung der Kontaktintegrale (5.312) und (5.313) benötigten lokalen, geometrischen Quadraturgrößen wird das Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) in die Menge \mathcal{E}_c aufgenommen.

¹¹⁴Die Mächtigkeit der Menge \mathcal{E}_c , also die Anzahl der hierin enthaltenen Elemente, entspricht der Anzahl akzeptierter Mortar-Segmente n_{clip} .

auf $\gamma_c^{h(1)}$ bzw. $\tilde{\gamma}_c^{h(1)}$ durchgeführt, sondern auf der geometrischen Approximation

$$\gamma_c^\Delta = \bigcup_{z=1}^{n_{\text{cells}}} \gamma_z^{\text{cell}} \approx \tilde{\gamma}_c^{h(1)}. \quad (5.364)$$

Die Gebietsapproximation (5.364) der slave-seitigen Kontaktoberfläche $\tilde{\gamma}_c^{h(1)}$ durch das physikalische Integrationsgebiet γ_c^Δ entspricht dabei der Aneinanderreihung sämtlicher detektierter n_{clp} Mortar-Segmente, die jeweils den in eine Hilfsebene projizierten gemeinsamen Überlappungsbereich (Überschneidungspolygon) eines Slave-Master-Elementpaares $(e_S, e_M) \in \mathcal{E}_c$ kennzeichnen. Infolge der Triangulierung jedes Mortar-Segments in n_{cell} Integrationszellen bzw. der Unterteilung von γ_c^Δ in insgesamt $n_{\text{cells}} = \sum_{k=1}^{n_{\text{clp}}} n_{\text{cell}}$ dreieckförmige Integrationsgebiete γ_z^{cell} , $z = 1, \dots, n_{\text{cells}}$, resultiert die in Gl. (5.364) angegebene Bereichszusammensetzung. Die Abbildungen 5.11 und 5.12 veranschaulichen den gesamt-heitlichen, dreidimensionalen Mortar-Kopplungsansatz anhand zweier exemplarischer Beispiele. In Bezug auf die Gleichungen (5.314) und (5.315) gelingt es nun, die defor-

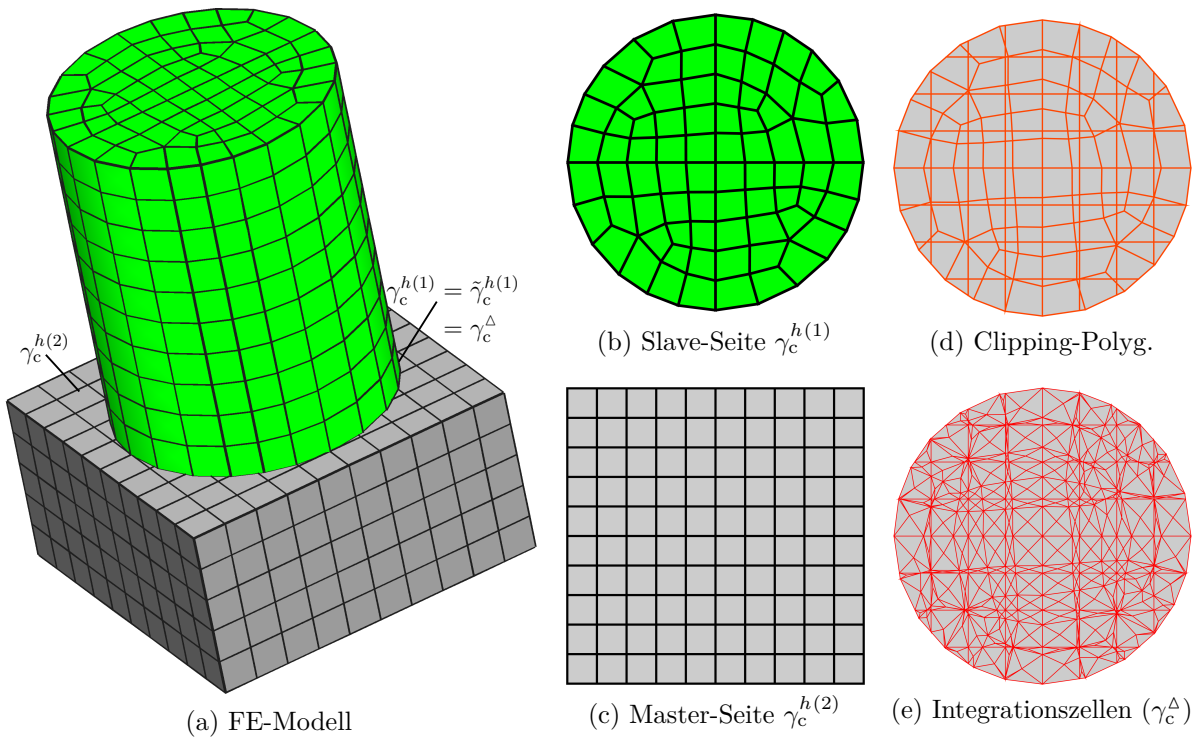


Abbildung 5.11: Dreidimensionaler Segmentierungsprozess für ein ebenes Kontakt-Interface, Slave- und Master-Oberfläche sind mit 4-knotigen linearen Viereck-Elementen (Quad4) diskretisiert

mationsabhängigen Komponenten der Mortar-Operatoren, $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$, als eine

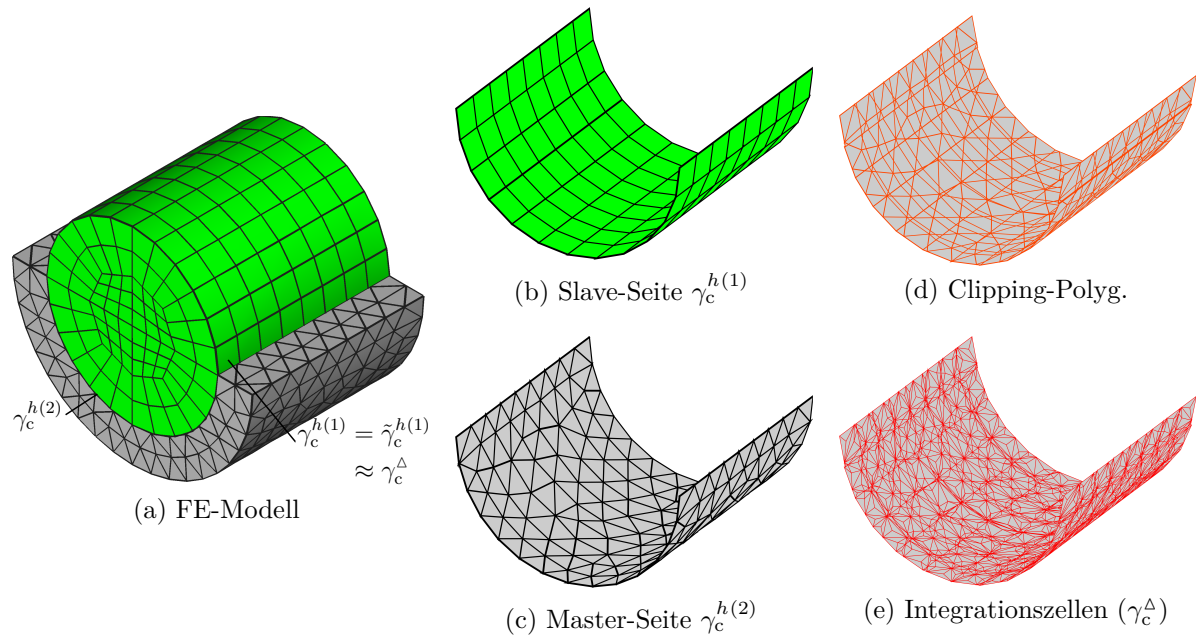


Abbildung 5.12: Dreidimensionaler Segmentierungsprozess für ein gekrümmtes Kontakt-Interface, Slave-Oberfläche diskretisiert mit 4-knotigen linearen Viereck-Elementen (Quad4), Master-Oberfläche diskretisiert mit 3-knotigen linearen Dreieck-Elementen (Tri3)

Summe über sämtliche n_{cells} Integrationszellen

$$\hat{D}_{rs}(\mathbf{u}) = \sum_{z=1}^{n_{\text{cells}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \Xi_r(\xi_g^{(1)}, \mathbf{u}) N_s^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g), \quad r \in \mathcal{S}, \quad s \in \mathcal{S}, \quad (5.365)$$

$$\hat{M}_{rt}(\mathbf{u}) = \sum_{z=1}^{n_{\text{cells}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \Xi_r(\xi_g^{(1)}, \mathbf{u}) N_t^{(2)}(\xi_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g), \quad r \in \mathcal{S}, \quad t \in \mathcal{M}, \quad (5.366)$$

darzustellen.¹¹⁵ In den Quadraturausdrücken (5.365) und (5.366) symbolisiert $\det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g)$ die am Gauß-Punkt $\tilde{\xi}_g$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, ausgewertete konstante Jacobi-Determinante

$$\det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g) = \det \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \chi_t^{\text{cell}}(\tilde{\xi}) \right] \bigg|_{\tilde{\xi}_g} = \|\{\tilde{\mathbf{x}}_1^{\text{cell}} - \tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}}\} \times \{\tilde{\mathbf{x}}_2^{\text{cell}} - \tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}}\}\| = \text{const.}, \quad (5.367)$$

$z = 1, \dots, n_{\text{cells}}$, der aus den Ecken $\tilde{\mathbf{x}}_1^{\text{cell}}$, $\tilde{\mathbf{x}}_2^{\text{cell}}$ und $\tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}}$ zusammengesetzten Integrationszelle z . Obwohl nicht durchgehend explizit gekennzeichnet, sind aufgrund der Tatsache, dass die Mortar-Segmentierung und numerische Quadratur in der Momentankonfiguration ausgeführt werden, nahezu alle in diesem Abschnitt aufgelisteten Größen und Beziehungen,

¹¹⁵Eine Implementierung basierend auf den Vorschriften (5.365) und (5.366) ist nicht effektiv. Für eine effiziente numerische Umsetzung sollten in der Integration für ein gegebenes globales Knotenpaar (r, s) bzw. (r, t) nur Integrationszellen Berücksichtigung finden, die einen Beitrag in der Quadratur liefern.

als deformationsabhängig einzustufen. Hierunter fallen neben den Mortar-Projektionen auf die Slave- und Master-Seite, siehe Gl. (5.356) und (5.357), die hierdurch induzierte Definition der Überschneidungspolygone sowie deren Zerlegung in Integrationszellen. Mit Blick auf die Anwendung impliziter Zeitintegrationsverfahren, siehe Abschnitt 5.6, und der anknüpfenden iterativen Lösungsprozedur vom Newton-Raphson-Typ ist eine konsistente Linearisierung der Gleichungen (5.365) und (5.366) bezüglich den unbekannten Verschiebungen $\mathbf{u}^T = \{\mathbf{u}_N^T, \mathbf{u}_S^T, \mathbf{u}_M^T\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ sowie aller zur Aufstellung der Kontaktintegrale involvierten, mit dem Deformationszustand gekoppelten Größen, erforderlich. Obwohl der Anteil $\mathbf{u}_N \in \mathbb{R}^{n_{uuN}}$ an der Interfacediskretisierung nicht teilnimmt und damit in den Abhängigkeiten für $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ bzw. den globalen Kopplungsoperatoren $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u})$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u})$ nicht mitgeführt werden müsste, wird an dieser Stelle zugunsten einer verkürzten Schreibweise auf eine diffizilere Unterscheidung verzichtet. Der angesprochene Linearisierungsprozess wird eingehend in Abschnitt 5.7 erläutert.

Um den Übergang zu einer lokal orientierten und implementationsnahen Darstellung auf Basis von elementbezogenen Zuordnungs- und Ansatzfunktionsmatrizen, siehe Abschnitt 5.1, aufzuzeigen, wird ein Mortar-Segment im Folgenden als ein spezifisches Interface-Element, welches sich aus einem Slave-Element e_S und einem Master-Element e_M zusammensetzt, interpretiert. Zu diesem Zweck werden außerdem die lokalen, elementbezogenen Interpolationsformeln für das primäre und virtuelle Verschiebungsfeld benötigt. In vollständiger Analogie zu Abschnitt 5.1 lauten diese:

$$\mathbf{u}^{h(i)}(\mathbf{x}^{h(i)}, t)|_{\gamma^{h(i)}} = \mathbf{N}_u^{e(i)}(\boldsymbol{\xi}^{(i)})\mathbf{u}^{e(i)}(t), \quad \delta\mathbf{u}^{h(i)}(\mathbf{x}^{h(i)})|_{\gamma^{h(i)}} = \mathbf{N}_u^{e(i)}(\boldsymbol{\xi}^{(i)})\delta\mathbf{u}^{e(i)}, \quad (5.368)$$

$i = 1, 2$, mit

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_u^{e(i)} &= [\mathbf{N}_{u1}^{e(i)} \dots \mathbf{N}_{u\beta}^{e(i)}] \in \mathbb{R}^{3 \times n_u^{e(i)}}, \quad \mathbf{N}_{ua}^{e(i)} = N_a^{(i)} \mathbf{I}_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad a = 1, \dots, n_{en}^{(i)}, \\ \mathbf{u}^{e(i)} &= \mathbf{Z}_u^{e(i)} \mathbf{u}, \quad \mathbf{u}^{e(i)T} = \{\mathbf{u}_1^{e(i)T}, \dots, \mathbf{u}_\beta^{e(i)T}\} \in \mathbb{R}^{n_u^{e(i)}}, \quad \beta = n_{en}^{(i)}, \\ \mathbf{u}_a^{e(i)} &= \{u_a^{e(i)}, v_a^{e(i)}, w_a^{e(i)}\}^T \in \mathbb{R}^3, \quad a = 1, \dots, n_{en}^{(i)}, \\ \delta\mathbf{u}^{e(i)} &= \mathbf{Z}_u^{e(i)} \delta\mathbf{u}, \quad \delta\mathbf{u}^{e(i)T} = \{\delta\mathbf{u}_1^{e(i)T}, \dots, \delta\mathbf{u}_\beta^{e(i)T}\} \in \mathbb{R}^{n_u^{e(i)}}, \quad \beta = n_{en}^{(i)}, \\ \delta\mathbf{u}_a^{e(i)} &= \{\delta u_a^{e(i)}, \delta v_a^{e(i)}, \delta w_a^{e(i)}\}^T \in \mathbb{R}^3, \quad a = 1, \dots, n_{en}^{(i)}, \\ \mathbf{Z}_u^{e(i)} &\in \mathbb{R}^{n_u^{e(i)} \times n_{uu}}, \quad n_u^{e(i)} = 3 \times n_{en}^{(i)} \end{aligned} \quad (5.369)$$

Neben der Zuordnung der lokalen Verschiebungsfreiheitsgrade eines Oberflächenelements auf $\gamma_c^{h(i)}$ zu den globalen Vektoren $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\delta\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ durch $\mathbf{Z}_u^{e(i)}$, $i = 1, 2$, können die elementbezogenen Freiheitsgradvektoren auch durch die Koinzidenzstrukturen $\mathbf{Z}_u^{e_S} \in \mathbb{R}^{n_u^{e(1)} \times n_{uuS}}$ und $\mathbf{Z}_u^{e_M} \in \mathbb{R}^{n_u^{e(2)} \times n_{uuM}}$ herausgefiltert werden. Exemplarisch anhand der virtuellen Interfaceverschiebungen veranschaulicht, gilt:

$$\delta\mathbf{u}^{e(1)} = \mathbf{Z}_u^{e_S} \delta\mathbf{u}_S \in \mathbb{R}^{n_u^{e(1)}}, \quad \delta\mathbf{u}^{e(2)} = \mathbf{Z}_u^{e_M} \delta\mathbf{u}_M \in \mathbb{R}^{n_u^{e(2)}} \quad (5.370)$$

Wie bereits im Rahmen der globalen Betrachtungen zu Beginn dieses Abschnitts angemerkt, ist das Lagrange-Multiplikatorfeld auf der Slave-Seite definiert und jeder Knoten eines Slave-Elements bekommt einen vektorwertigen Lagrange-Multiplikator zugewiesen,

sodass stets $n_\lambda^e = n_u^{e(1)} = 3 \times n_{\text{en}}^{(1)}$ erfüllt ist. Die Interpolationsvorschrift innerhalb eines Elements für die duale Feldvariable lautet daher wie folgt:

$$\boldsymbol{\lambda}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t) = \Xi_\lambda^e(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \mathbf{u}) \boldsymbol{\lambda}^e(t), \quad \text{mit} \quad (5.371)$$

$$\begin{aligned} \Xi_\lambda^e &= \left[\Xi_{\lambda 1}^e \cdots \Xi_{\lambda n_{\text{en}}^{(1)}}^e \right] \in \mathbb{R}^{3 \times n_\lambda^e}, \quad \Xi_{\lambda a}^e = \Xi_a \mathbf{I}_3, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}, \\ \boldsymbol{\lambda}^e &= \mathbf{Z}_\lambda^e \boldsymbol{\lambda}, \quad \mathbf{Z}_\lambda^e \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_{\text{uuS}}}, \quad \boldsymbol{\lambda}^{eT} = \{\boldsymbol{\lambda}_1^{eT}, \dots, \boldsymbol{\lambda}_{n_{\text{en}}^{(1)}}^{eT}\} \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e}, \\ \boldsymbol{\lambda}_a^e &= \{\lambda_{xa}^e, \lambda_{ya}^e, \lambda_{za}^e\}^T \in \mathbb{R}^3, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)} \end{aligned} \quad (5.372)$$

Für die Approximation der Variation $\delta \boldsymbol{\lambda}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)$ im Elementgebiet gelten kongruente Zusammenhänge. Ein weiterer Punkt, welcher bei der Entwicklung einer lokal orientierten Gleichungsstruktur Berücksichtigung findet, ist eine alternative Darstellung der Gebietszerlegung (5.364) für die segmentbasierte Approximation des Integrationsgebiets γ_c^Δ . Aus Gründen, die in Abschnitt 5.5.4 detailliert dargelegt werden, substituiert für die folgenden Ausführungen die gleichwertige, geschachtelte Verknüpfungsoperation

$$\gamma_c^\Delta = \bigcup_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \bar{\gamma}^{e(1)}, \quad \bar{\gamma}^{e(1)} = \bigcup_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{eS}} \gamma_p^{\text{clp}}, \quad \gamma_p^{\text{clp}} = \bigcup_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \gamma_z^{\text{cell}} \quad (5.373)$$

die Aggregationsvorschrift aus Gl. (5.364). In Analogie zu Gl. (5.363)₁ kennzeichnet in Gl. (5.373)₁ $\bar{\gamma}^{e(1)}$ den tatsächlich von n_{clp}^{eS} Überschneidungspolygonen überdeckten Flächenanteil des in die Hilfsebene projizierten Slave-Elements e_S , woraus die Verkettung (5.373)₂ hervorgeht. Der polygonale Überlappungsbereich γ_p^{clp} , der dem aus dem Slave-Element e_S und dem Master-Element e_M gebildeten Mortar-Segment p , $p = 1, \dots, n_{\text{clp}}^{eS}$, zugeordnet ist, setzt sich dann wiederum aus n_{cell} , für das jeweilige Mortar-Segment p charakteristischen Integrationszellen zusammen, siehe Gl. (5.373)₃. Das dreieckförmige Integrationsgebiet einer Zelle z , $z = 1, \dots, n_{\text{cell}}$, symbolisiert γ_z^{cell} . Abb. 5.13 veranschaulicht die beschriebene, geschachtelte Gebietszerlegung schematisch. Unter Berücksichtigung von Gl. (5.373) sowie den Interpolationsansätzen (5.368) und (5.371) resultieren schließlich für die globalen Mortar-Operatoren $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ die Assemblierungsabbildungen

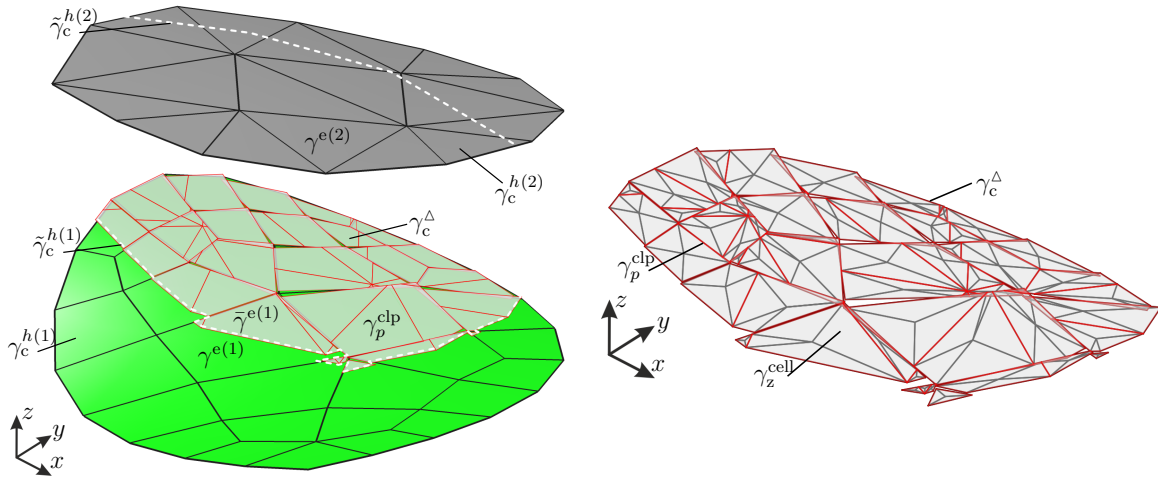
$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \mathbf{Z}_\lambda^{eT} \hat{\mathbf{D}}^{eS}(\mathbf{u}) \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \mathbf{Z}_\lambda^{eT} \hat{\mathbf{M}}^{eS}(\mathbf{u}), \quad \text{mit} \quad (5.374)$$

$$\hat{\mathbf{D}}^{eS}(\mathbf{u}) = \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{eS}} \hat{\mathbf{D}}_{\text{clp}}^p(\mathbf{u}) \mathbf{Z}_u^{eS} \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_{\text{uuS}}}, \quad \hat{\mathbf{M}}^{eS}(\mathbf{u}) = \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{eS}} \hat{\mathbf{M}}_{\text{clp}}^p(\mathbf{u}) \mathbf{Z}_u^{eM} \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_{\text{uuM}}} \quad (5.375)$$

und den mit einem Interface-Element assoziierten Untermatrizen

$$\hat{\mathbf{D}}_{\text{clp}}^p(\mathbf{u}) = \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(1)}}, \quad (5.376)$$

$$\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{u}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \Xi_\lambda^{eT}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}, \mathbf{u}) \mathbf{N}_u^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(1)}}, \quad (5.377)$$



- (a) Dreidimensionale Mortar-Segmentierung für ein gekrümmtes Kontakt-Interface, Slave-Oberfläche diskretisiert mit 4-knotigen linearen Viereck-Elementen (Quad4), Master-Oberfläche diskretisiert mit 3-knotigen linearen Dreieck-Elementen (Tri3)
- (b) Aggregation der dreieckförmigen Integrationsgebiete γ_z^{cell} , $z = 1, \dots, n_{\text{cells}}$, zu γ_c^{Δ}

Abbildung 5.13: Segmentbasierte Approximation des Integrationsgebiets, Visualisierung der Gebietszerlegung (5.373)

$$\hat{\mathbf{M}}_{\text{clp}}^p(\mathbf{u}) = \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \hat{\mathbf{M}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\lambda}^e \times n_{\mathbf{u}}^{e(2)}}, \quad (5.378)$$

$$\hat{\mathbf{M}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{u}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \Xi_{\lambda}^{eT}(\xi_g^{(1)}, \mathbf{u}) \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^{e(2)}(\xi_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g) \in \mathbb{R}^{n_{\lambda}^e \times n_{\mathbf{u}}^{e(2)}}. \quad (5.379)$$

Aus diesen implementationsnahen Vorschriften für $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u})$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u})$ ist es direkt möglich, die globalen Komponenten $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, $s \in \mathcal{S}$, und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, $t \in \mathcal{M}$, zu extrahieren, sodass beispielsweise für die knotenweise Berechnung der Abstandsfunktion $\tilde{g}_r(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, siehe Gl. (5.324), nur noch auf bereits ausgewertete Größen zurückgegriffen werden muss. Demgegenüber stellt allerdings die globale Aneinanderreihung der Mortar-Matrizen gemäß Gl. (5.319) zum Aufstellen des Interface-Operators $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uu}}}$, dessen lineare Abbildung (5.320) den Kontaktkraftvektor $\mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ definiert, keine algorithmisch ausgereifte Implementationsvariante dar. Unter Verwendung der Koinzidenzstrukturen $\mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^{e(i)} \in \mathbb{R}^{n_{\mathbf{u}}^{e(i)} \times n_{\text{uu}}}$, $i = 1, 2$, lässt sich alternativ der Interface-Operator

$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uu}}}$ in Gestalt von

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{u}) &= \hat{\mathbf{B}}_{\hat{D}}(\mathbf{u}) - \hat{\mathbf{B}}_{\hat{M}}(\mathbf{u}), \quad \text{mit} \\ \hat{\mathbf{B}}_{\hat{D}}(\mathbf{u}) &= \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuN}}} & \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) & \mathbf{0}_{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}} \end{bmatrix} = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{(1)}} \mathbf{Z}_{\lambda}^{eT} \left[\sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{\text{es}}} \hat{\mathbf{D}}_{\text{clp}}^p(\mathbf{u}) \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^{e(1)} \right], \\ \hat{\mathbf{B}}_{\hat{M}}(\mathbf{u}) &= \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuN}}} & \mathbf{0}_{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}} & \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \end{bmatrix} = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{(1)}} \mathbf{Z}_{\lambda}^{eT} \left[\sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{\text{es}}} \hat{\mathbf{M}}_{\text{clp}}^p(\mathbf{u}) \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^{e(2)} \right], \end{aligned} \quad (5.380)$$

formulieren. Die Deklaration von $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{u})$ in Kombination mit der Filteroperation (5.372)₃, d. h. $\lambda^e = \mathbf{Z}_{\lambda}^e \lambda$, induziert für den Kontaktkraftvektor die Berechnungsvorschrift

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \lambda) &= \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{(1)}} \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{\text{es}}} \left\{ \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^{e(1)T} \mathbf{f}_c^{e(1)} - \mathbf{Z}_{\mathbf{u}}^{e(2)T} \mathbf{f}_c^{e(2)} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}, \\ \mathbf{f}_c^{e(1)}(\mathbf{u}, \lambda) &= \hat{\mathbf{D}}_{\text{clp}}^{pT}(\mathbf{u}) \lambda^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{u}}^{e(1)}}, \quad \mathbf{f}_c^{e(2)}(\mathbf{u}, \lambda) = \hat{\mathbf{M}}_{\text{clp}}^{pT}(\mathbf{u}) \lambda^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{u}}^{e(2)}}. \end{aligned} \quad (5.381)$$

Zur numerischen Quadratur von Gl. (5.365) und (5.366) bzw. von Gl. (5.377) und (5.379) innerhalb einer Integrationszelle werden Standardintegrationsregeln für Dreieckselemente vom Gauß-Typ, vgl. [Cowper, 1973; Wriggers, 2008; Dhett et al., 2012; Zienkiewicz et al., 2013], verwendet, siehe hierzu auch Abschnitt B.2. In verschiedenen numerischen Experimenten haben Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b] und Popp et al. [2010] nachgewiesen, dass mit einer Anzahl von sieben Gauß-Punkten, d. h. $n_{\text{GP}}^{\text{cell}} = 7$, eine hinreichende Genauigkeit erzielt wird.¹¹⁶ Diese Quadraturordnung reicht aus, um für Oberflächendiskretisierungen bestehend aus 3-knotigen linearen Dreieck-Elementen (Tri3) und unverwölbten 4-knotigen linearen Viereck-Facetten (Quad4)¹¹⁷ die Ausdrücke (5.365) und (5.366) exakt zu integrieren.¹¹⁸ Eine Reproduktion des exakten Integralwertes für die Gl. (5.365) und (5.366) ist jedoch im Fall von verwölbten Oberflächenelementen, bei denen die Transformationsabbildungen $\chi_t^{\Delta(1)}$ und $\chi_t^{\Delta(2)}$ rationalen Polynomfunktionen entsprechen, ausgeschlossen.

Während der Segmentierungsalgorithmus 5.1 die höchste Präzision zur numerischen Integration von $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ bietet, geht jedoch der hierfür benötigte erhöhte numerische Aufwand zu Lasten der Effizienz. Aus diesem Grund wurden in den letzten Jahren effizientere mortar-basierte Kontaktformulierungen in der Literatur vorgestellt. Als prominente Vertreter hierunter sind die Arbeiten von Fischer und Wriggers [2005], Fischer und Wriggers [2006], Tur et al. [2009] und Tur et al. [2012] zu nennen. Anstatt

¹¹⁶Die Wahl einer geeigneten Integrationsregel bleibt in einem gewissen Maß von dem zu behandelnden Problem abhängig. Weist das Integrationsverfahren eine zu hohe Genauigkeitsordnung als nötig auf, besteht allerdings keine Gefahr des Auftretens von Locking-Effekten.

¹¹⁷Planare Quad4-Facetten entsprechen Parallelprogrammen.

¹¹⁸Für Interfacevernetzungen bestehend aus Tri3-Facetten ist sogar $n_{\text{GP}}^{\text{cell}} = 3$ ausreichend, siehe [Puso und Laursen, 2004b]. Es wird darüber hinaus gezeigt, dass konservative Kontakt-Patch-Tests, bei denen der konstante Spannungszustand über ein ebenes Kontakt-Interface übertragen wird, auch mit weniger Gauß-Punkten auskommen.

der stückweise stetigen Unterteilung der Kontaktschnittstelle in Mortar-Segmente wird die numerische Quadratur elementweise auf der Slave- bzw. Non-Mortar-Seite unter Vernachlässigung der Knicke in den zu integrierenden Funktionen ausgeführt. Der numerische Effizienzvorteil wird hierbei durch eine geringere Genauigkeit in der Quadratur erkauft. Wie Fischer und Wriggers [2005] zeigen, ist bereits die exakte Erfüllung eines zweidimensionalen Kontakt-Patch-Test sehr stark von der im Integrationsgebiet des Slave-Elements verwendeten Gauß-Punktzahl abhängig. Farah et al. [2015] kommen zu dem Schluss, dass jedoch die Qualität einer segmentbasierten Quadratur im Vergleich zu einer elementweise durchgeführten Integration unerreicht bleibt.

Ergänzungen zu quadratischen Elementen Das bisher präsentierte Segmentierungskonzept eignet sich nur zur Behandlung von Oberflächenelementen mit linearen Interpolationsansätzen.¹¹⁹ Die üblicherweise gekrümmten Oberflächenfacetten quadratischer Elemente¹²⁰ verlangen daher nach einer entsprechenden Erweiterung des Segmentierungsalgorithmus, die erstmals von Puso et al. [2008] formuliert wurde und in der vorliegenden Arbeit angewendet wird. Der Grundgedanke besteht darin, die quadratischen Oberflächenelemente in weitere n^{sub} linear interpolierte Teilsegmente (Untersegmente) zu zerlegen, siehe Abb. 5.14. Die Koordinatentransformationen innerhalb jedes Untersegments

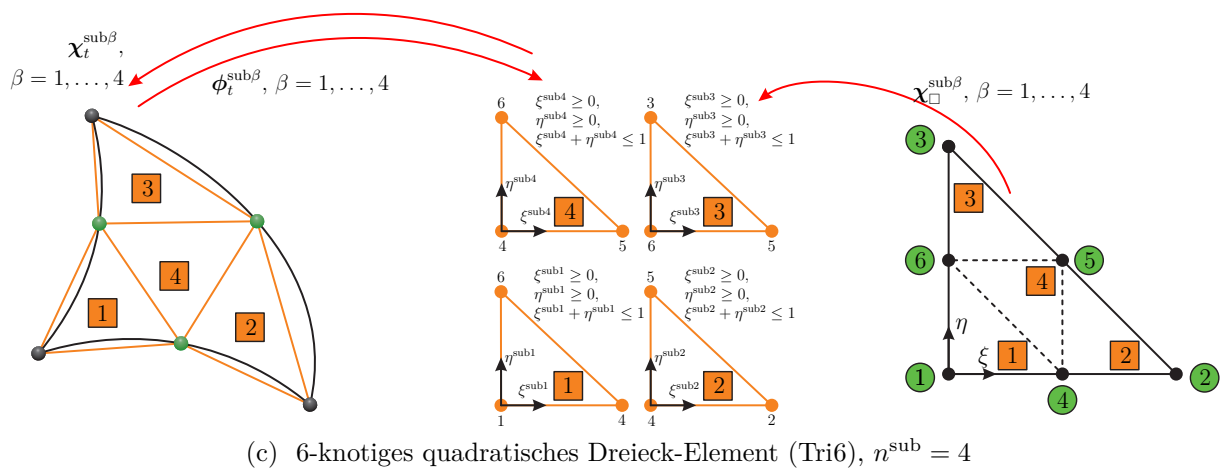
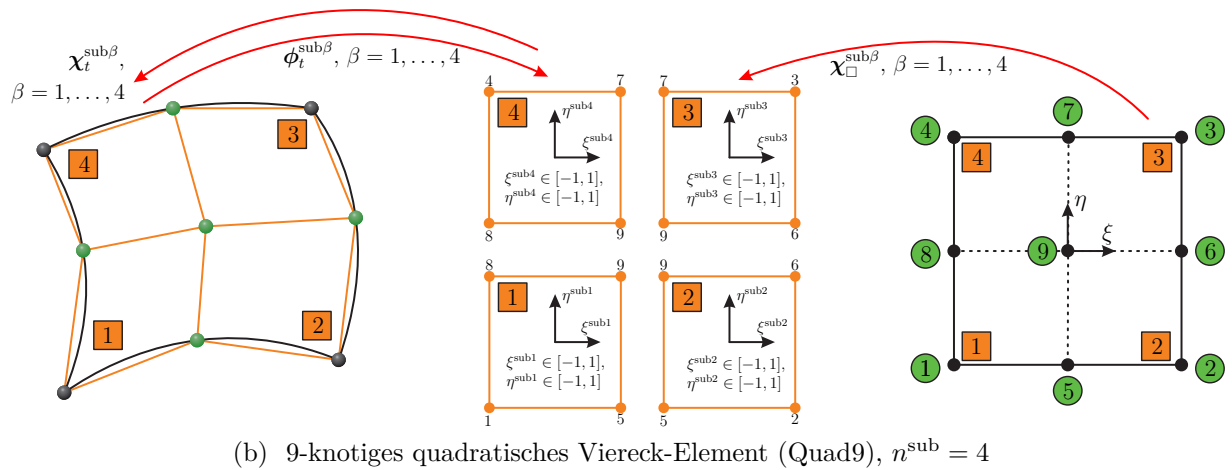
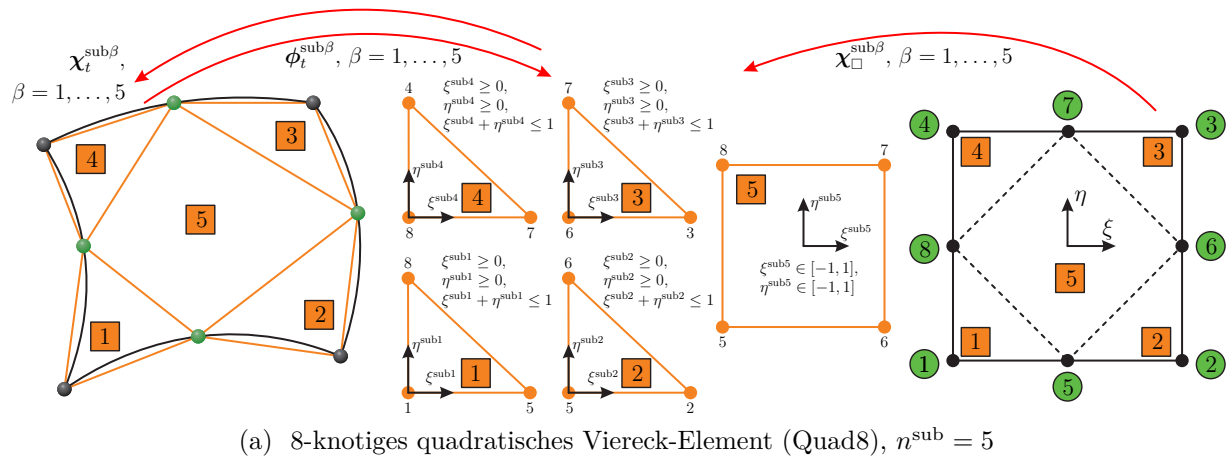
$$\mathbf{x}^{\text{sub}\beta} = \chi_t^{\text{sub}\beta}(\boldsymbol{\xi}^{\text{sub}\beta}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{\text{sub}\beta}} N_a^{\text{sub}\beta}(\boldsymbol{\xi}^{\text{sub}\beta}) \mathbf{x}_a^{\text{sub}\beta} \Leftrightarrow \boldsymbol{\xi}^{\text{sub}\beta} = \boldsymbol{\phi}_t^{\text{sub}\beta}(\mathbf{x}^{\text{sub}\beta}), \quad (5.382)$$

$\beta = 1, \dots, n^{\text{sub}}$, werden in Anlehnung an Gl. (5.11) mit den linearen Standardansatzfunktionen $N_a^{\text{sub}\beta}(\boldsymbol{\xi}^{\text{sub}\beta})$ für ein Rechteck- oder Dreieck-Element, siehe auch Tab. B.1, und den entsprechenden Ecken des Untersegments $\mathbf{x}_a^{\text{sub}\beta}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{\text{sub}\beta}$, definiert. Verständlicherweise impliziert die Gebietsapproximation in einzelne Untersegmente eine Verletzung der zugrunde liegenden FEM-Oberflächenbeschreibung. Die Kopplungsstrategie 5.1 wird nun anstatt auf ein komplettes Slave-Master-Elementpaar auf ein Paar sich potentiell überlappender Untersegmente $(e_S, e_M) \in \mathcal{E}_c$ der gegenüberliegenden Kontaktoberflächen appliziert. Entgegen den Definitionen aus den vorherigen Paragraphen gelten für das Facettenpaar $(e_S, e_M) \in \mathcal{E}_c$ folgende mengenbezogene Zuordnungen:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_c &\subseteq \mathcal{E}_S \times \mathcal{E}_M = \{(e_S, e_M) \mid e_S \in \mathcal{E}_S, e_M \in \mathcal{E}_M\}, \\ \mathcal{E}_S &= \{(\hat{e}_S, \text{sub}_{e_S}) \mid \hat{e}_S \in \hat{\mathcal{E}}_S, \text{sub}_{e_S} \in \{1, \dots, n^{\text{sub}(1)}\}\}, & \hat{\mathcal{E}}_S &= \{1, \dots, n_c^{e(1)}\}, \\ \mathcal{E}_M &= \{(\hat{e}_M, \text{sub}_{e_M}) \mid \hat{e}_M \in \hat{\mathcal{E}}_M, \text{sub}_{e_M} \in \{1, \dots, n^{\text{sub}(2)}\}\}, & \hat{\mathcal{E}}_M &= \{1, \dots, n_c^{e(2)}\} \end{aligned} \quad (5.383)$$

¹¹⁹Mit dem in Auflistung 5.1 vorgestellten Segmentierungsalgorithmus können bislang nur von Raumdiskretisierungen mit 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8) und 4-knotigen linearen Viereck-Elementen (Tet4) abgeleitete Oberflächenfacetten, d. h. Oberflächendiskretisierungen mit 4-knotigen linearen Viereck-Elementen (Quad4) und 3-knotigen linearen Dreieck-Elementen (Tri3), behandelt werden.

¹²⁰Für dreidimensionale Interfaceproblemstellungen fallen hierunter Oberflächendiskretisierungen mit 6-knotigen quadratischen Dreieck-, 9-knotigen und 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Tri6, Quad9, Quad8), die aus entsprechenden Raumdiskretisierungen mit 10-knotigen quadratischen Tetraeder-, 27-knotigen und 20-knotigen quadratischen Hexaeder-Elementen (Tet10, Hex27, Hex20) hervorgehen.


 Abbildung 5.14: Unterteilung von quadratischen Oberflächenfacetten in n^{sub} linear interpolierte Teilsegmente

Das Einführen einfacher affiner Transformationsabbildungen $\chi_{\square}^{\text{sub}\beta} : \Omega_{\square} \rightarrow \Omega_{\square}^{\text{sub}\beta}$, $\beta = 1, \dots, n^{\text{sub}}$, welche in Tab. 5.10 zusammengefasst sind, ermöglicht die Parame-

Tabelle 5.10: Affine Transformationsabbildungen $\chi_{\square}^{\text{sub}\beta}$, $\beta = 1, \dots, n^{\text{sub}}$, für Oberflächendiskretisierungen mit quadratischen Elementen (Quad9, Quad8, Tri6)

	Quad9	Quad8	Tri6
$\xi^{\text{sub}1} = \chi_{\square}^{\text{sub}1}(\xi) =$	$\begin{Bmatrix} 2\xi + 1 \\ 2\eta + 1 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 1 + \xi \\ 1 + \eta \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 2\xi \\ 2\eta \end{Bmatrix}$
$\xi^{\text{sub}2} = \chi_{\square}^{\text{sub}2}(\xi) =$	$\begin{Bmatrix} 2\xi - 1 \\ 2\eta + 1 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} \xi - \eta - 1 \\ 1 + \eta \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 2\xi - 1 \\ 2\eta \end{Bmatrix}$
$\xi^{\text{sub}3} = \chi_{\square}^{\text{sub}3}(\xi) =$	$\begin{Bmatrix} 2\xi - 1 \\ 2\eta - 1 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} \xi + \eta - 1 \\ 1 - \xi \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 2\xi \\ 2\eta - 1 \end{Bmatrix}$
$\xi^{\text{sub}4} = \chi_{\square}^{\text{sub}4}(\xi) =$	$\begin{Bmatrix} 2\xi + 1 \\ 2\eta - 1 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} \eta - \xi - 1 \\ 1 - \eta \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 2(\xi + \eta) - 1 \\ 1 - 2\xi \end{Bmatrix}$
$\xi^{\text{sub}5} = \chi_{\square}^{\text{sub}5}(\xi) =$	-	$\begin{Bmatrix} \eta + \xi \\ \eta - \xi \end{Bmatrix}$	-

trisierung des Referenzelements $\xi = \{\xi, \eta\}^T \in \Omega_{\square}$ und des Teilsegments $\xi^{\text{sub}\beta} = \{\xi^{\text{sub}\beta}, \eta^{\text{sub}\beta}\}^T \in \Omega_{\square}^{\text{sub}\beta}$, $\beta = 1, \dots, n^{\text{sub}}$, ineinander zu überführen. Die Verwendung der inversen Transformation $\phi_{\square}^{\text{sub}\beta} = \left(\chi_{\square}^{\text{sub}\beta}\right)^{-1}$ erlaubt es dann, vergleichbar zu Abb. 5.10, die benötigten Verknüpfungsabbildungen

$$\chi_t^{\Delta(1)}(\tilde{\xi}) = \phi_{\square}^{\text{sub}\beta} \left(\phi_t^{\text{sub}\beta(1)} \left(\tilde{\phi}_t^{\text{cell}(1)}(\chi_t^{\text{cell}}(\tilde{\xi})) \right) \right), e_S = (\hat{e}_S, \text{sub}_{e_S}), \text{sub}_{e_S} = \beta \quad (5.384)$$

und

$$\chi_t^{\Delta(2)}(\tilde{\xi}) = \phi_{\square}^{\text{sub}\alpha} \left(\phi_t^{\text{sub}\alpha(2)} \left(\tilde{\phi}_t^{\text{cell}(2)}(\chi_t^{\text{cell}}(\tilde{\xi})) \right) \right), e_M = (\hat{e}_M, \text{sub}_{e_M}), \text{sub}_{e_M} = \alpha \quad (5.385)$$

in diskreter Form aufzustellen und weiterhin die Ansatzfunktionsprodukte höherer Ordnung (5.312) und (5.313) auf der durch die Mortar-Segmente bzw. auf der durch die Integrationszellen approximierten „virtuellen“ Zwischenschicht auszuwerten. Abb. 5.15 illustriert den gesamtheitlichen, dreidimensionalen Mortar-Kopplungsansatz für eine Vernetzung mit quadratischen Elementen anhand des bereits in Abb. 5.12 vorgestellten exemplarischen Beispiels eines gekrümmten Kontakt-Interface. Obwohl die Anzahl der Elemente für beide Vernetzungsvarianten identisch ist, vgl. Abbildungen 5.12 und 5.15, enthüllt der visuelle Vergleich der Abb. 5.12d und 5.15d bzw. der Abb. 5.12e und 5.15e, dass aus der Diskretisierung mit den Ansätzen höherer Ordnung infolge der zusätzlichen Unterteilung in Untersegmente signifikant mehr Mortar-Segmente bzw. Integrationszellen resultieren. Verständlicherweise impliziert dies auch einen höheren numerischen Aufwand. Für weitere Details zur Behandlung von Oberflächendiskretisierungen mit quadratischen Ansatzfunktionen sei auf [Puso et al., 2008] referiert.

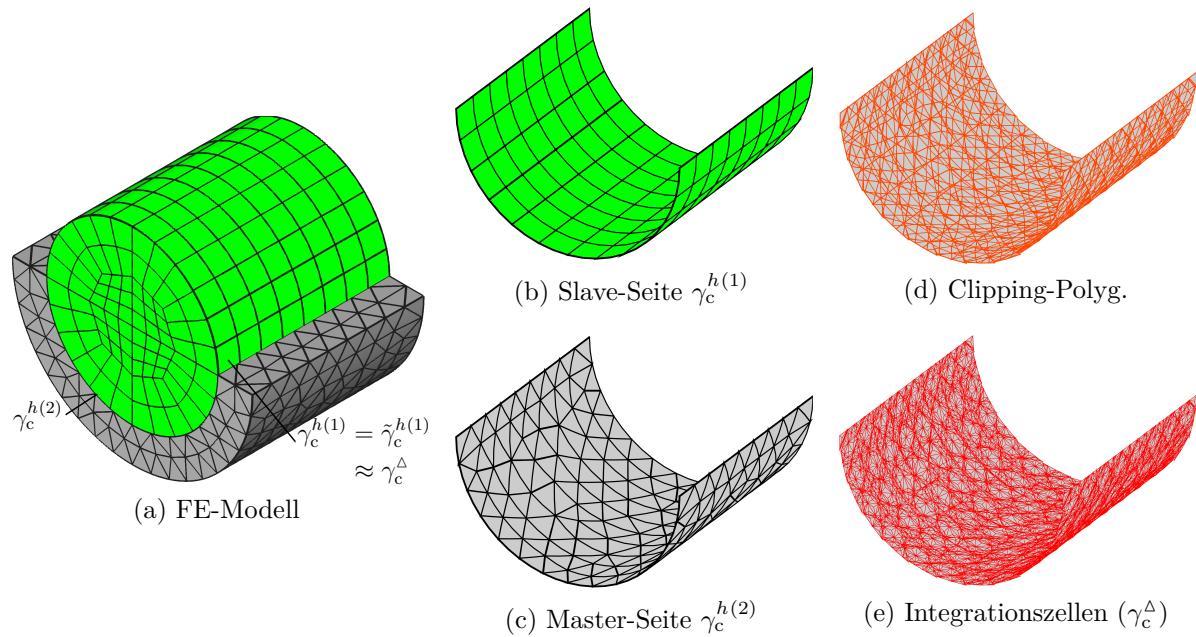


Abbildung 5.15: Dreidimensionaler Segmentierungsprozess für ein gekrümmtes Kontakt-Interface, Slave-Oberfläche diskretisiert mit 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad8), Master-Oberfläche diskretisiert mit 6-knotigen quadratischen Dreieck-Elementen (Tri6)

5.5.3 Auswertung von Mortar-Integralen in 2D

Prinzipiell können sämtliche Konzepte aus Abschnitt 5.5.2 auf die Auswertung der Kontaktintegrale (5.312) und (5.313) in 2D übertragen werden. Abermals basiert die numerische Quadratur zur Berechnung der Komponenten $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ der globalen Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u})$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u})$ auf der Einführung stückweiser stetiger Integrationsgebiete. Zur Bestimmung dieser Mortar-Segmente sind eindeutige Projektionsregeln erforderlich, die pathologische Spezialfälle vermeiden. Ein wichtiger Bestandteil des zweidimensionalen Kopplungsalgorithmus ist daher die Konstruktion eines kontinuierlichen \mathcal{C}^0 -stetigen Normalenvektorfeldes. Die nachfolgenden Ausführungen geben hierüber Auskunft.

Bestimmung eines kontinuierlichen Normalenfeldes in 2D Die in diesem Unterabschnitt vorgestellte Vorgehensweise zur Konstruktion eines kontinuierlichen \mathcal{C}^0 -stetigen Normalenvektorfeldes auf der Non-Mortar-Seite für den zweidimensionalen Fall entspricht weitgehend dem von Yang et al. [2005] vorgeschlagenen Ansatz, wobei allerdings auf Grundlage derselben Argumentation wie in Abschnitt 5.5.2 auf eine Gewichtung in Form von der am Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ angrenzenden Elemente und deren zugehörigen Elementlängen verzichtet wird. Für einen anschaulichen Überblick zu diversen Gewichtungsstrategien für die Mittelung von Normalenfelder sei auf [Hammer, 2012, S. 32] sowie [Jin et al., 2005] verwiesen. Der an jedem Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ nach außen gerichtete Einheitsnormalenvektoren \mathbf{n}_s lässt sich gemäß Gl. (5.345) durch den Ausdruck

$\mathbf{n}_s = \hat{\mathbf{n}}_s / \|\hat{\mathbf{n}}_s\|$, mit $\hat{\mathbf{n}}_s = \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}$, generieren. Die Bestimmung des elementbezogenen, diskontinuierlichen Normalenvektors $\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}$ erfolgt jedoch für den zweidimensionalen Fall basierend auf der Vorschrift

$$\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|} = \mathbf{e}_3 \times \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|}, \quad \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|} = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\xi_s^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)}, \quad \tilde{e} = 1, \dots, n_s^{\text{adj}}, \quad s \in \mathcal{S}, \quad (5.386)$$

mit dem kartesischen Basisvektor in z -Richtung $\mathbf{e}_3 = \{0, 0, 1\}^T$, $\|\mathbf{e}_3\| = 1$. Die Diskretisierung der slave-seitigen Kontaktoberfläche mit linearen bzw. quadratischen Linienelementen sowie die hieraus hervorgehenden Szenarios sind schematisch in Abbildung 5.16 veranschaulicht. Mit Ausnahme von Randknoten und Mittelknoten bei 3-knotigen quadra-

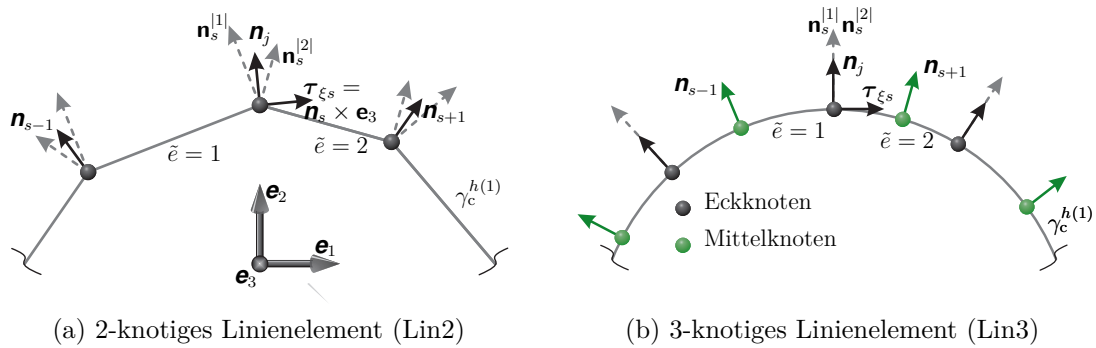


Abbildung 5.16: Konstruktion eines auf der Slave-Seite $\gamma_c^{h(1)}$ errichteten, kontinuierlichen Normalenvektorfelds in 2D

tischen Linienelementen (Lin3), für welche offensichtlich $n_s^{\text{adj}} = 1$ gilt und eine Mittelung wegfällt, sind alle Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ von zwei benachbarten Linienfacetten umgeben, d. h. $n_s^{\text{adj}} = 2$. Aufgrund der für die Ansatzfunktionen mindestens vorliegenden \mathcal{C}^1 -Stetigkeit innerhalb des Elementgebiets wird auch in Kombination mit den genannten Sonderfällen ein kontinuierliches Normalenvektorfeld (5.348) produziert.¹²¹ Durch Koinzidenz von \mathbf{e}_3 mit der in zwei Dimensionen für die Komponentendarstellung der Vektoren nicht weiter relevanten senkrechten Richtung folgt der normierte Tangentialvektor $\boldsymbol{\tau}_{\xi s}$, $s \in \mathcal{S}$, unmittelbar aus

$$\boldsymbol{\tau}_{\xi s} = \mathbf{n}_s \times \mathbf{e}_3 = -\mathbf{e}_3 \times \mathbf{n}_s, \quad s \in \mathcal{S} \quad (5.387)$$

bzw. hierzu äquivalent aus der gemittelten Summe

$$\boldsymbol{\tau}_{\xi s} = \frac{\sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|}}{\|\sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|}\|}, \quad s \in \mathcal{S}. \quad (5.388)$$

Die räumlich interpolierten Felder \mathbf{n}^h und $\boldsymbol{\tau}^h = [\boldsymbol{\tau}_\xi^h]$ werden identisch zu den Gleichungen (5.348) und (5.353) gebildet.

¹²¹Eine identische Aussage gilt für sämtliche Randknoten und Mittelknoten bei 9-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad9-Elementen) im 3D-Fall.

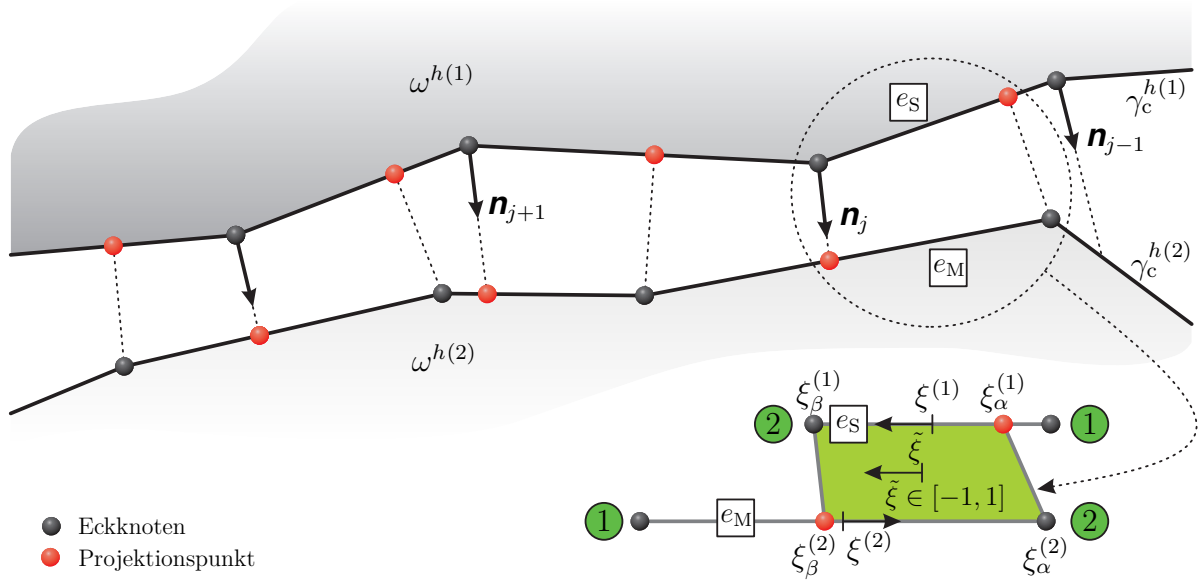
Segmentierung Traditionelle Diskretisierungstechniken zur Unterteilung des Integrationsgebiets in einzelne Segmente basieren auf der klassischen orthogonalen Projektion,¹²² siehe hierzu auch [Simo et al., 1985b; Papadopoulos und Taylor, 1992; McDevitt und Laursen, 2000]. Dabei wird jeder Knoten eines Linienelements in der Kontaktschnittstelle auf eine Elementfacette des gegenüberliegenden Kontaktrands durch Lösung des minimalen Distanzproblems projiziert. Leider sind diese Projektionen nicht immer eindeutig oder die detektierten Punkte liegen außerhalb des zulässigen Elementgebiets. Ein von Yang et al. [2005] vorgestellter Mortar-Projektionsalgorithmus verwendet zur Definition der linienförmigen Mortar-Kontakt-Segmente bzw. Kontakt-Segmente in 2D das im vorherigen Paragraphen eingeführte kontinuierliche Normalenvektorfeld, wodurch die exemplarisch in [Papadopoulos und Taylor, 1992; Wriggers, 2006] beschriebenen pathologischen Spezialfälle eines diskontinuierlichen Normalenvektorfeldes aufgrund von Nichteindeutigkeit vermieden werden können. Die einzelnen Hauptschritte dieser mortar-basierten Kopplungsstrategie fasst für ein Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) , deren slave- und master-seitig projizierten Intersektionsbereiche ein Kontakt-Segment festlegen, die algorithmische Auflistung 5.2 zusammen.¹²³ Die potentielle Detektierung der Überlappung des Elementpaares folgt aus der globalen Kontaktsuche, siehe hierzu Abschnitt 5.8. Abbildung 5.17 illustriert den zweidimensionalen Projektions- und Integrationsalgorithmus schematisch.

In Abhängigkeit der eingesetzten Oberflächendiskretisierung für die Master-Seite $\gamma_c^{h(2)}$ entspricht Gl. (5.389) aufgrund des konstanten zu projizierenden Slave-Knotens $\mathbf{x}_b^{e(1)}$, $b = 1, 2$, und des dort definierten Normalenvektors \mathbf{n}_b einer linearen bzw. quadratischen Bestimmungsgleichung für $\xi_b^{(2)}$, $b = 1, 2$. Im Gegensatz hierzu wächst infolge der Kopplung mit der Interpolationsformel (5.348) für das kontinuierliche Normalenvektorfeld der Polynomgrad für die slave-seitige Projektionsvorschrift (5.390) an. Es empfiehlt sich daher zumeist für die Lösung der nichtlinearen Gleichung (5.390) die Verwendung eines lokalen Newton-Raphson-Verfahrens. Analytische Lösungen der skalaren Komponentengleichungen (5.389) und (5.390) für die z -Richtung sind bis zu einem Polynomgrad von zwei in Anhang C.1 hinterlegt.

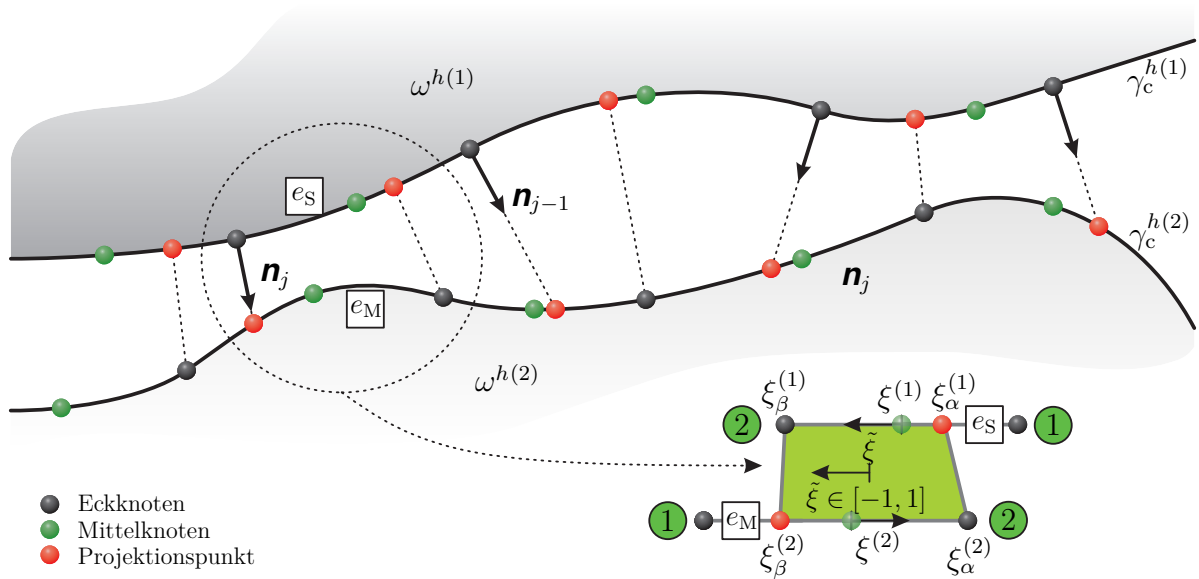
Aufgrund der präsenten \mathcal{C}^2 -Stetigkeit im Elementgebiet ist es im Fall einer Oberflächendiskretisierung mit quadratischen Linien-Elementen ausreichend, lediglich den Anfangs- und Endknoten auf die gegenüberliegende Facette zu projizieren, siehe Abb. 5.17b. Daher bedarf es an dieser Stelle unter Berücksichtigung der lokalen Knotennummerierung für 3-knotige quadratische Linienelemente (Lin3), siehe Abschnitt B.1, keiner weiteren konzeptionellen Modifikationen des Kopplungsalgorithmus 5.2. Für weitere Details zur Implementation sei auf [Yang et al., 2005; Hartmann, 2007; Cichosz und Bischoff, 2011; Cichosz, 2012; Popp, 2012] verwiesen.

¹²²Für weitere Anmerkungen zur sogenannten „closest point projection“ Methodik (CPP) sei auf Kapitel 3 und die dort zitierte Literatur referiert.

¹²³Der angegebene Algorithmus 5.2 ist sowohl für lineare als auch für quadratische Elemente gültig.



(a) Zweidimensionale Segmentierung für ein Kontakt-Interface bestehend aus 2-knotigen linearen Linien-Elementen (Lin2)



(b) Zweidimensionale Segmentierung für ein Kontakt-Interface bestehend aus 3-knotigen quadratischen Linien-Elementen (Lin3)

Abbildung 5.17: Mortar-basierte-Kopplungsstrategie (Segmentierung) auf Basis eines kontinuierlichen Normalenvektorfeldes in 2D für ein Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M)

Algorithmus 5.2:

1. Für den Anfangs- und Endknoten $\mathbf{x}_b^{e(1)}$, $b = 1, 2$, des Slave-Elements e_S werden die zugehörigen Projektionspunkte $\chi_t^{e(2)}(\xi_b^{(2)})$, $b = 1, 2$, auf dem Master-Element e_M , mit den Knoten $\mathbf{x}_a^{e(2)}$, $a = 1, \dots, n_{en}^{(2)}$, in Abhängigkeit der unbekannten lokalen

Projektionskoordinate $\xi_b^{(2)}$, $b = 1, 2$, durch Lösung von

$$\left\{ \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a^{(2)}(\xi_b^{(2)}) \mathbf{x}_a^{e(2)} \right\} - \mathbf{x}_b^{e(1)} \right\} \times \mathbf{n}_b = \mathbf{0}, \quad b = 1, 2, \quad (5.389)$$

bestimmt, siehe Abb. 5.17. Der entsprechende lokale Normalenvektor \mathbf{n}_b , $b = 1, 2$, am Knoten $\mathbf{x}_b^{e(1)}$ lässt sich aus den mit globalen Slave-Knotenindizes deklarierten Normalenvektoren \mathbf{n}_s , $s \in \mathcal{S}$, herausfiltern.

2. Für den Anfangs- und Endknoten $\mathbf{x}_b^{e(2)}$, $b = 1, 2$ des Master-Elements e_M werden die zugehörigen Projektionspunkte $\chi_t^{e(1)}(\xi_b^{(1)})$, $b = 1, 2$, auf dem Slave-Element e_S , mit den Knoten $\mathbf{x}_a^{e(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, in Abhängigkeit der unbekannten lokalen Projektionskoordinate $\xi_b^{(1)}$, $b = 1, 2$, durch Lösung von

$$\left\{ \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_b^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)} \right\} - \mathbf{x}_b^{e(2)} \right\} \times \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_b^{(1)}) \mathbf{n}_a \right\} = \mathbf{0}, \quad b = 1, 2, \quad (5.390)$$

berechnet, siehe Abb. 5.17.

3. Zur Definition eines Mortar-Kontakt-Segments werden aus den lokalen Elementkoordinaten von e_S bzw. e_M die Segmentgrenzen $\xi_\alpha^{(1)}$, $\xi_\beta^{(1)}$, $\xi_\alpha^{(2)}$ und $\xi_\beta^{(2)}$, welche gemäß Abb. 5.17 aus den lokalen slave- bzw. master-seitigen Projektionspunkten¹²⁴ sowie den Randknotenkoordinaten, welche den eindimensionalen Parameterraum der Elemente begrenzen, extrahiert. Mit anderen Worten können die slave-seitigen Segmentenden $\xi_\alpha^{(1)}$ und $\xi_\beta^{(1)}$ entweder lokale Knotenkoordinaten, die e_S links bzw. rechts abstecken, oder andererseits Projektionen von Master-Knoten auf e_S repräsentieren. Entsprechend inverse Aussagen gelten für das Master-Element e_M des zu bildenden Kontakt-Segments. Der vollständige Algorithmus zur Selektion der Segmentenden $\xi_\alpha^{(1)}$, $\xi_\beta^{(1)}$, $\xi_\alpha^{(2)}$ und $\xi_\beta^{(2)}$ ist im Struktogramm C.1 dargestellt.
4. Zur Durchführung der numerischen Gauß-Quadratur von Gl. (5.312) und (5.313) wird eine Parametrisierung in Abhängigkeit von $\tilde{\xi} \in [-1, 1]$ für ein zweidimensionales Mortar-Kontakt-Segment eingeführt. In Kombination mit den lokalisierten Segmentgrenzen auf der Slave- und Master Seite $\xi_\alpha^{(1)}$, $\xi_\beta^{(1)}$, $\xi_\alpha^{(2)}$, $\xi_\beta^{(2)}$ lauten die linear interpolierten Transformationsabbildungen

$$\xi^{(i)} = \chi_t^{\text{seg}(i)}(\tilde{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \tilde{\xi})\xi_\alpha^{(i)} + \frac{1}{2}(1 + \tilde{\xi})\xi_\beta^{(i)}, \quad i = 1, 2. \quad (5.391)$$

Hieraus folgen die an den Gauß-Punkten des Segments $\tilde{\xi}_g$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{seg}}$, ausgewerteten lokalen Elementkoordinaten $\xi_g^{(1)} = \chi_t^{\text{seg}(1)}(\tilde{\xi}_g)$ und $\xi_g^{(2)} = \chi_t^{\text{seg}(2)}(\tilde{\xi}_g)$.¹²⁵

¹²⁴Gelingt es nicht, einen der lokalen Projektionspunkte $\xi_b^{(i)}$, $i = 1, 2$, $b = 1, 2$, durch Lösung von Gl. (5.389) bzw. Gl. (5.390) zu ermitteln, wird dieser verworfen. Bei der Selektion der Segmentenden $\xi_\alpha^{(1)}$, $\xi_\beta^{(1)}$, $\xi_\alpha^{(2)}$ und $\xi_\beta^{(2)}$ werden daher nur Lösungen von erfolgreich durchgeführten Projektionsoperationen betrachtet.

¹²⁵Popp [2012] verwendet zur Bestimmung von $\xi_g^{(2)} = \chi_t^{\text{seg}(2)}(\tilde{\xi}_g)$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{seg}}$, anstatt der für $i = 2$

detektierten Mortar-Kontakt-Segmenten durch die geschachtelte Koordinatenabbildung $\mathbf{x}^{h(1)} = \chi_t^{e(1)}(\chi_t^{\text{seg}(1)}(\tilde{\xi}))$ zuordnen lassen. Im Gegensatz zum dreidimensionalen Interface-Kopplungskonzept in Abschnitt 5.5.2 findet die Quadratur nicht auf einer geometrischen Approximation, sondern tatsächlich, wie von den analytischen Ausdrücken (5.312) und (5.313) gefordert, auf dem Teilbereich $\tilde{\gamma}_c^{h(1)} \subset \gamma_c^{h(1)}$ der Slave-Seite statt. Die Komponenten der Mortar-Operatoren, \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} , lassen sich damit für den zweidimensionalen Fall als eine Summe über alle n_{segs} linienförmigen Kontakt-Segmente darstellen. Es gilt

$$\hat{D}_{rs}(\mathbf{u}) = \sum_{s=1}^{n_{\text{segs}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \Xi_r(\xi_g^{(1)}, \mathbf{u}) N_s^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g), \quad r \in \mathcal{S}, \quad s \in \mathcal{S}, \quad (5.393)$$

$$\hat{M}_{rt}(\mathbf{u}) = \sum_{s=1}^{n_{\text{segs}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \Xi_r(\xi_g^{(1)}, \mathbf{u}) N_t^{(2)}(\xi_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g), \quad r \in \mathcal{S}, \quad t \in \mathcal{M}, \quad (5.394)$$

mit der am Gauß-Punkt $\tilde{\xi}_g$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{seg}}$, ausgewerteten Jacobi-Determinante für das Kontakt-Segment

$$\begin{aligned} \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) &= \det \left\{ \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left(\chi_t^{e(1)} \circ \chi_t^{\text{seg}(1)} \right) \right\} \Big|_{\tilde{\xi}=\tilde{\xi}_g} = \det \left\{ \frac{\partial \chi_t^{e(1)}}{\partial \xi^{(1)}} \frac{d\chi_t^{\text{seg}(1)}}{d\tilde{\xi}} \right\} \Big|_{\tilde{\xi}=\tilde{\xi}_g} \\ &= \det \mathbf{j}^{e(1)}(\xi_g^{(1)}) \frac{\xi_\beta^{(1)} - \xi_\alpha^{(1)}}{2}, \quad s = 1, \dots, n_{\text{segs}}. \end{aligned} \quad (5.395)$$

In Gl. (5.395) repräsentieren $\xi_\alpha^{(1)}$ und $\xi_\beta^{(1)}$ die an der Definition des Kontakt-Segments beteiligten, slave-seitigen Segmentenden sowie $\det \mathbf{j}^{e(1)}$ die Jacobi-Determinante des zugehörigen Slave-Elements e_S . In Anlehnung an Yang et al. [2005] und Popp [2012] wird zur numerischen Integration der Mortar-Integrale (5.312) und (5.313) eine Gauß-Punktregel mit fünf Integrationspunkten, d. h. $n_{\text{GP}}^{\text{seg}} = 5$, gewählt. Die Deformationsabhängigkeit für $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) = [\hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u})]$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) = [\hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u})]$ rührt neben der Integration über den Rand $\tilde{\gamma}_c^{h(1)} \subset \gamma_c^{h(1)}$ aus der angewendeten Interface-Segmentierung in der Momentankonfiguration. Mit Blick auf die Anwendung impliziter Zeitintegrationsverfahren, siehe Abschnitt 5.6, und der anknüpfenden iterativen Lösungsprozedur vom Newton-Raphson-Typ ist eine konsistente Linearisierung der Gleichungen (5.393) und (5.394) bezüglich der unbekannten Verschiebungen $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ erforderlich. Konsequenterweise muss daher ein konsistenter Linearisierungsschritt in Bezug auf die Mortar-Operatoren, siehe Abschnitt 5.7, die Projektionen zwischen Slave- und Master-Seite sowie die hierauf basierende Zerlegung in stückweise stetige Integrationsbereiche (Kontakt-Segmente) einbeziehen.

Für den Übergang zu einer lokal orientierten Darstellung der Gl. (5.393) und (5.394) wird eine im Vergleich zu Abschnitt 5.5.2 kongruente Verfahrensweise verfolgt. Zu diesem Zweck substituiert für die folgenden Ausführungen die alternative, jedoch gleichwertige Gebietszerlegung

$$\tilde{\gamma}_c^{h(1)} = \bigcup_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \tilde{\gamma}^{e(1)}, \quad \gamma_c^{e(1)} = \bigcup_{s=1}^{n_{\text{seg}}^{e_S}} \gamma_s^{\text{seg}} \quad (5.396)$$

Gl. (5.392). Analog zu Gl. (5.363)₁ kennzeichnet $\tilde{\gamma}^{e(1)}$ in Gl. (5.396)₁ den von n_{clp}^{eS} Mortar-Kontakt-Segmenten, denen jeweils das slave-seitige, physikalische Integrationsgebiet γ_s^{seg} zugewiesen werden kann, tatsächlich überdeckten Flächenanteil des Slave-Elements e_S , woraus die elementbezogene Verkettung (5.396)₂ hervorgeht. Für die globalen Mortar-Operatoren $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ ergeben sich damit die Assemblierungsbeziehungen

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \mathbf{z}_\lambda^{eT} \hat{\mathbf{D}}^{eS}(\mathbf{u}) \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \mathbf{z}_\lambda^{eT} \hat{\mathbf{M}}^{eS}(\mathbf{u}), \quad \text{mit} \quad (5.397)$$

$$\hat{\mathbf{D}}^{eS}(\mathbf{u}) = \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^{eS}} \hat{\mathbf{D}}_{\text{seg}}^s(\mathbf{u}) \mathbf{z}_u^{eS} \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_{\text{uuS}}}, \quad \hat{\mathbf{M}}^{eS}(\mathbf{u}) = \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^{eS}} \hat{\mathbf{M}}_{\text{seg}}^s(\mathbf{u}) \mathbf{z}_u^{eM} \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_{\text{uuM}}} \quad (5.398)$$

und den mit einem Kontakt-Segment (Interface-Element) assoziierten Untermatrizen

$$\hat{\mathbf{D}}_{\text{seg}}^s(\mathbf{u}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \Xi_\lambda^{eT}(\xi_g^{(1)}, \mathbf{u}) \mathbf{N}_u^{e(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(1)}}, \quad (5.399)$$

$$\hat{\mathbf{M}}_{\text{seg}}^s(\mathbf{u}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \Xi_\lambda^{eT}(\xi_g^{(1)}, \mathbf{u}) \mathbf{N}_u^{e(2)}(\xi_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(2)}}. \quad (5.400)$$

Des Weiteren gilt für das im vorliegenden Abschnitt beschriebene zweidimensionale, unilaterale Kontaktszenario $n_\lambda^e = n_u^{e(1)} = 2 \times n_{\text{en}}^{(1)}$ und $n_u^{e(2)} = 2 \times n_{\text{en}}^{(2)}$. Basierend auf den Definitionen (5.399) und (5.400) sowie der Filteroperation $\lambda^e = \mathbf{Z}_\lambda^e \lambda$ liefert die Berechnungsvorschrift

$$\mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \lambda) = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^{eS}} \left\{ \mathbf{z}_u^{e(1)T} \mathbf{f}_c^{e(1)} - \mathbf{z}_u^{e(2)T} \mathbf{f}_c^{e(2)} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}, \quad (5.401)$$

$$\mathbf{f}_c^{e(1)}(\mathbf{u}, \lambda) = \hat{\mathbf{D}}_{\text{seg}}^{sT}(\mathbf{u}) \lambda^e \in \mathbb{R}^{n_u^{e(1)}}, \quad \mathbf{f}_c^{e(2)}(\mathbf{u}, \lambda) = \hat{\mathbf{M}}_{\text{seg}}^{sT}(\mathbf{u}) \lambda^e \in \mathbb{R}^{n_u^{e(2)}}$$

eine implementationsnahe Version des Kontaktkraftvektors $\mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \lambda) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$.

5.5.4 Ansatzfunktionen für die Lagrange-Multiplikatoren

Ein weiterer Aspekt, den es bei der Aufstellung einer mortar-basierten Kontaktformulierung näher zu beleuchten gilt, ist die Spezifikation des diskreten Lagrange-Multiplikator-Lösungsraums \mathcal{M}_λ^h und dessen zugeordneten slave-seitigen Formfunktionen Ξ_r , $r \in \mathcal{S}$, zur Interpolation des Lagrange-Multiplikatorfeldes $\lambda^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)$ und der Variation $\delta \lambda^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)$. In der vorliegenden Arbeit werden zwei verschiedene Klassen von diskreten Lagrange-Multiplikatoren, nämlich die Standard- und die Dualen-Lagrange-Multiplikatoren, diskutiert. Der Fokus ist jedoch, aufgrund einer herausragenden algorithmischen Besonderheit, auf die letztere Gruppe gerichtet.

5.5.4.1 Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation

In Bezug auf Mortar-Methoden sind Standard-Lagrange-Multiplikatoren die klassische Wahl zur Interpolation des Lagrange-Multiplikatorfeldes. Abgesehen von sogenannten Kreuzungspunkten, in denen sich unterschiedliche Kontaktzonen überlappen, oder Intersektionsbereichen von Dirichlet- und Kontaktträgern¹²⁶ führt dieser Ansatz zu identischen Formfunktionen für das slave-seitige Verschiebungs- und Lagrange-Multiplikatorfeld, d. h.

$$\Xi_r(\mathbf{x}^{h(1)}) = N_r^{(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}), \quad r \in \mathcal{S}. \quad (5.402)$$

Wie schon zu Beginn des Abschnitts 5.5.1 dargelegt, sind sämtliche Elemente der Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ mit einer übereinstimmenden Anzahl von $n_\lambda^e = n_u^{e(1)} = 3 \times n_{\text{en}}^{(1)}$ Verschiebungs- und Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgraden ausgestattet, sodass alternativ zu Gl. (5.402) auf lokaler Ebene der Zusammenhang

$$\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}), \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}, \quad \text{mit} \quad \hat{n}_{\text{en}}^{(1)} = n_{\text{en}}^{(1)}, \quad (5.403)$$

resultiert. Die Standardansatzfunktionen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, welche im Rahmen der behandelten h-Version der Finite-Elemente-Methode (h-FEM) aus Lagrange-Polynomen niedriger Ordnung konstruiert werden, sind in Tab. B.1 zusammengefasst. Abb. 5.20a zeigt schematisch für ein zweidimensionales FE-Modell die von der bilinearen Gebietszerlegung auf den Slave-Rand $\gamma_c^{h(1)}$ projizierten, hutförmigen Ansatzfunktionen. Für weitere Details zu den Eigenschaften von $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, sei auf Abschnitt B.1 referiert.

Die natürliche Wahl (5.403) impliziert, dass die den Funktionen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$ und $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, zugeordneten Polynomgrade $\hat{p}^{(1)}$ und \hat{p}_λ identisch sind, d. h. $\hat{p}^{(1)} = \hat{p}_\lambda$. Unter dieser Voraussetzung zeigen z. B. [Braess und Dahmen, 1998; Braess et al., 1999; Belgacem, 1999; Wohlmuth, 2001], dass für die gemischte Mortar-Formulierung die LBB-Stabilitätsbedingung erfüllt ist sowie die optimale Konvergenzrate für den Raumdiskretisierungsfehler erhalten bleibt. Gemäß den Darstellungen in [Popp, 2012] sollte der räumliche Diskretisierungsfehler in den Verschiebungen, falls eine ausreichende Regularität für das unilaterale Kontaktproblem postuliert werden kann, a priori Abschätzungen in Abhängigkeit einer gemittelten Netzweite h der Größenordnung $\mathcal{O}(h^{\hat{p}+1})$ für die \mathcal{L}^2 -Norm und $\mathcal{O}(h^{\hat{p}})$ in der Energienorm (H^1 -Norm) folgen.¹²⁷ Allerdings schränkt die Nichtlinearitätsressource in Gestalt des vorab unbekannten Übergangs zwischen aktiven und inaktiven Kontaktbereichen Annahmen an die Regularität der Lösung erheblich ein. Dies hat zur Folge, dass die zuvor erörterten Konvergenzraten zumeist nur bei Raumdiskretisierungen mit linearen Ansatzfunktionen zu beobachten sind. Die Fehleranalysen für quadratische FE-Diskretisierungen gestalten sich dagegen sehr viel filigraner. In [Wohlmuth et al., 2012] wird für Gebietszerlegungen mit quadratischen Elementen, die zur Interpolation der Lagrange-Multiplikatoren klassische bzw. duale Ansatzfunktionen heranziehen, eine allgemeine obere Schranke von $\mathcal{O}(h^{3/2})$ in der Energienorm, welche bei einer maximal postulierten Regularität zu erwarten ist, angegeben. Falls eine stark

¹²⁶Siehe auch Fußnote 85.

¹²⁷Hierbei sei u. a. angenommen, dass $\hat{p}^{(1)} = \hat{p}^{(2)} = \hat{p}$ gilt.

verminderte räumliche Regularität vorliegt, kann kein Vorteil eines quadratischen gegenüber eines linearen Raumdiskretisierungsansatzes mehr erwartet werden. Essentiellen Anteil an diesen Nachweisen hat auch die globale Reproduktionsordnung \hat{r}_λ , die bei Verwendung der klassischen Ansatzfunktionen mit dem vollständigen Polynomgrad $\hat{p}^{(1)}$ übereinstimmt, siehe auch Abschnitt B.1.

Abweichungen von dem Szenario $\hat{p}^{(1)} = \hat{p}_\lambda = \hat{r}_\lambda$ sind beispielsweise bei der Behandlung von quadratischen Finite-Elemente-Diskretisierungen sinnvoll, siehe hierzu [Puso et al., 2008; Popp et al., 2012]. So zeigen Seshaiyer und Suri [2000a] im Kontext der Laplace-Gleichung, einer elliptischen partiellen Differentialgleichung zweiter Ordnung, dass auch stückweise stetige Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, \hat{n}_{\text{en}}^{(1)}$, $\hat{n}_{\text{en}}^{(1)} < n_{\text{en}}^{(1)}$, vom Polynomgrad $\hat{p}_\lambda = \hat{p} - 1$ zur Interpolation von $\boldsymbol{\chi}^h$ und $\delta \boldsymbol{\chi}^h$ ausreichen, um die zuvor erwähnten Stabilitäts- und Konvergenzeigenschaften zu gewährleisten.¹²⁸ Um jedoch die eingangs gemachte Behauptung $n_\lambda^e = n_u^{e(1)}$ aufrechtzuerhalten, sei angemerkt, dass zur Behandlung von Interfacediskretisierungen mit quadratischen Ansätzen in der vorliegenden Arbeit ein von Popp [2012] vorgeschlagenes Konzept, welches die Interpolationsordnung im Elementgebiet erhält, Anwendung findet. Weitere Erläuterungen hierzu werden in Abschnitt 5.5.4.2 nachgereicht.

Des Weiteren wird an die mit den slave-seitigen Basisfunktionen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, äquivalenten Interpolationsansätze für die Lagrange-Multiplikatoren $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, die Einhaltung der Bedingung

$$\int_{\gamma^{e(1)}} N_a^{(1)} d\gamma^{e(1)} > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \int_{\gamma^{e(1)}} \Xi_a d\gamma^{e(1)} > 0 \quad \text{für } a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)} \quad (5.404)$$

gefordert. Die physikalische Motivation des Kriteriums der integralen Positivität (5.404) wird bei Betrachtung des folgenden in Abb. 5.19 visualisierten unilateralen Kontaktproblems, welches den geometrischen Annahmen

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^h|_{\gamma_c^{h(1)}} &= \sum_{s \in \mathcal{S}} N_s^{(1)} \mathbf{n}_s = \{0, 0, 1\}^T = \text{const.}, \quad \mathbf{n}_s = \{0, 0, 1\}^T = \text{const.}, \quad s \in \mathcal{S}, \\ \text{und} \quad \mathbf{x}^{h(2)}|_{\gamma_c^{h(2)}} \circ \boldsymbol{\chi}_{\gamma_c}^h &= \mathbf{x}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}} + H \mathbf{n}^h|_{\gamma_c^{h(1)}} \end{aligned} \quad (5.405)$$

zugrunde liegt, verständlich. Für das visualisierte Minimalbeispiel, mit den im konstanten vertikalen Abstand H , $H > 0$, voneinander getrennten planaren Kontaktflächen $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$, liegt demnach offensichtlich keine physikalische Durchdringung vor, d. h. $g^h > 0$. Dieses Verhalten sollte im Rahmen der angewendeten mortar-basierten Finite-Elemente-Methode auch von der in Gl. (5.324) definierten gewichteten Normalklaffung \tilde{g}_r am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ als $\tilde{g}_r > 0$ reflektiert werden. Nach Umformulieren

¹²⁸Zur Behandlung der unilateralen Kontaktproblematik im Kontext quadratischer Finite-Elemente-Diskretisierungen im \mathbb{R}^3 verwenden Puso et al. [2008] bilineare Standardansatzfunktionen, siehe Gl. (B.12), für die Interpolation der Kontaktspannungen. In diesem Fall sind nur die Eckknoten der slave-seitigen quadratischen Oberflächenelemente mit Lagrange-Multiplikatoren ausgestattet.

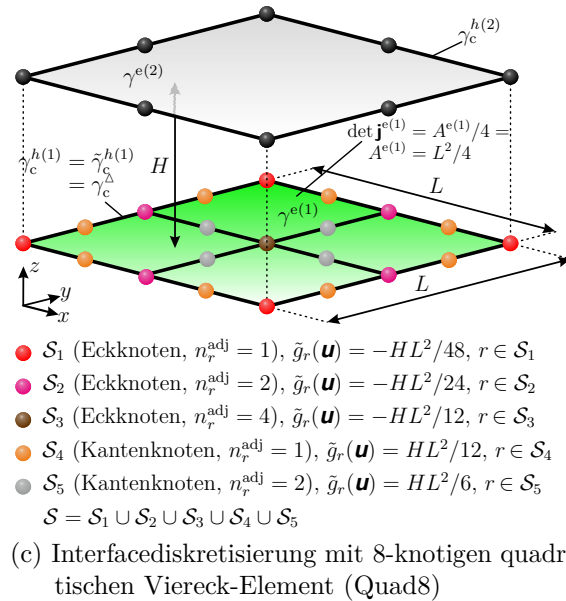
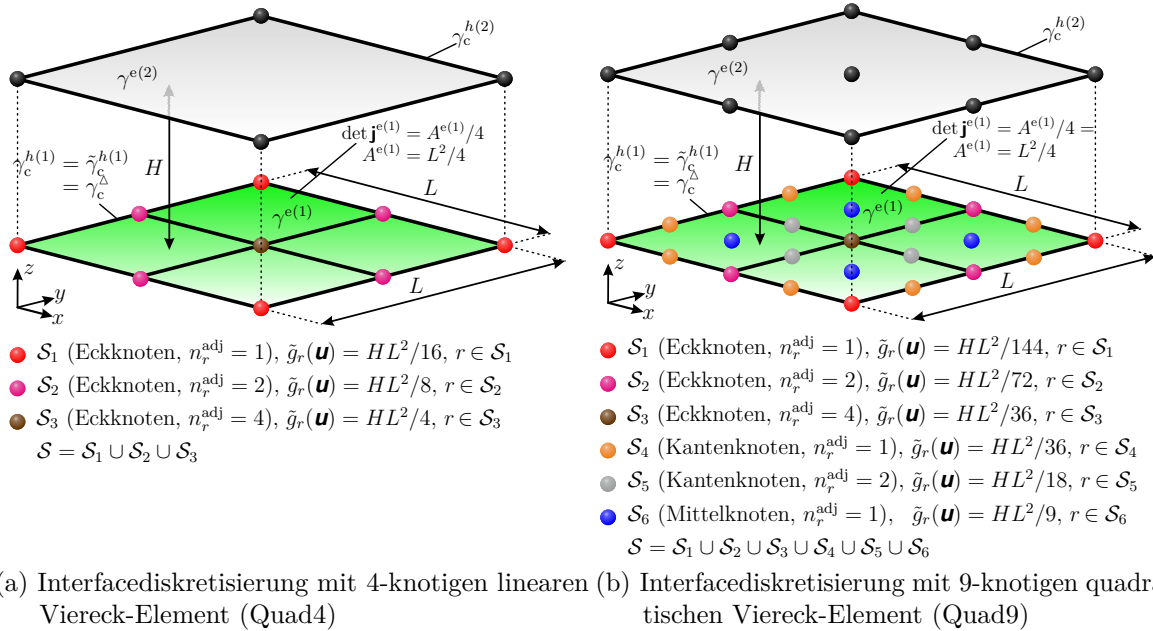


Abbildung 5.19: Unilaterales Kontaktproblem mit im konstanten Abstand H , voneinander getrennten flachen Kontaktflächen und einem mit Viereck-Elementen unterschiedlicher Interpolationsordnung (Quad4, Quad9 und Quad8) vernetztem Kontakt-Interface, physikalischer Plausibilitätstest für die gewichtete Normalklaffung \tilde{g}_r , $r \in \mathcal{S}$

der Berechnungsvorschrift (5.324) zu

$$\tilde{g}_r(\mathbf{u}) = \int_{\gamma_c^{h(1)}} \overbrace{-\left(\mathbf{n}_r^T \{\mathbf{x}^{h(1)}|_{\gamma_c^{h(1)}} - (\mathbf{x}^{h(2)}|_{\gamma_c^{h(2)}} \circ \chi_{\gamma_c}^h)\}\right)}^{g_r^h \approx g^h} \Xi_r d\gamma, \quad r \in \mathcal{S}, \quad (5.406)$$

und Substitution der getroffenen Annahmen (5.405) resultiert die einfache Beziehung

$$\tilde{g}_r(\mathbf{u}) = H \int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r d\gamma \quad \text{bzw.} \quad \tilde{g}_r(\mathbf{u}) = \frac{HL^2}{16} \sum_{\tilde{e}=1}^{n_r^{\text{adj}}} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \Xi_r d\xi^{(1)} d\eta^{(1)}, \quad (5.407)$$

mit den im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ angrenzenden Elementen \tilde{e} , $\tilde{e} = 1, \dots, n_r^{\text{adj}}$. Da sich die in Gestalt eines gleichseitigen Quadrats, mit der Kantenlänge L , umrahmte Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ durch eine äquidistante, nicht verzerrte Vernetzung auszeichnet, gelingt es die Determinante der elementbezogenen Funktionalmatrix für die Koordinatentransformation $\det \mathbf{j}^{e(1)} = A^{e(1)}/4 = \text{const.}$, mit der Facettenfläche $A^{e(1)} = L^2/4$, als konstanten Faktor in Gl. (5.407)₂ zu extrahieren. Damit liefert Gl. (5.407) die einfache Interpretation, dass sämtliche Normalklaffungen \tilde{g}_r , $r \in \mathcal{S}$, nur bei Sicherstellung von Gl. (5.404) für die an den Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ angrenzenden n_r^{adj} Elemente die Forderung nach $\tilde{g}_r > 0$ erfüllen. Um einen Zusammenhang zwischen Ξ_r und Ξ_a herzustellen, muss verständlicherweise der globale Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ in den zugehörigen lokalen Knoten a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, des Elements \tilde{e} , $\tilde{e} = 1, \dots, n_r^{\text{adj}}$ abgebildet werden. Aufgrund dieses eindeutig betrachteten Problemfalls repräsentiert das Kriterium der integralen Positivität (5.404) nur eine Minimalanforderung, welche von sämtlichen Lagrange-Multiplikator Interpolationsfunktionen eingehalten werden sollte. Eine weitaus schärfere Restriktion stellt die Forderung nach nicht-negativen Ansatzfunktionen im Elementgebiet $\Omega_{\square}^{(1)}$, d. h. $\Xi_a \geq 0$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, dar. Der Vorschlag ist ebenfalls leicht unter Berücksichtigung der alternativen Definition (5.406) für die knotenweise definierte, gewichtete Normalklaffung \tilde{g}_r , $r \in \mathcal{S}$, und einer positiven, allerdings nicht konstanten Abstandsfunktion $g^h \approx g_r^h$ nachzuvollziehen. Widerspricht die globale Basisfunktion Ξ_r , $r \in \mathcal{S}$, dieser stringenter Forderung, d. h. $\Xi_r \not\geq 0$, kann es im Rahmen eines solchen Szenarios vorkommen, dass als Resultat der Skalierung von g_r^h mit Ξ_r in Gl. (5.406), trotz Erfüllung des Kriteriums der integralen Positivität (5.404), negative Werte $\tilde{g}_r < 0$ an einzelnen Slave-Knoten hervorgehen. Neben der offensichtlich vorliegenden kontinuumsmechanischen Diskrepanz verhindern die physikalisch nicht plausiblen Klaffungswerte eine erfolgreiche Konvergenz der angewendeten Aktiven-Mengen-Strategie, siehe Abschnitt 5.5.5. Aus der visuellen Analyse der in den Abb. C.5 bis C.11 dargestellten Standardansatzfunktionen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, ist direkt ersichtlich, dass lediglich Elementtypen mit einem linearen Interpolationsansatz, d. h. 2-knotige lineare Linien- (Lin2), 4-knotige lineare Viereck- (Quad4) und 3-knotige lineare Dreieck-Interface-Elemente (Tri3), das scharfe Anforderungskriterium nach Nichtnegativität auf $\Omega_{\square}^{(1)}$ erfüllen. Diese Feststellung für die zuletzt aufgezählten Oberflächenfacettenformen impliziert auch die Einhaltung der schwächeren integralen Bedingung (5.404). Als Folge hiervon resultieren in Abb. 5.19a physikalisch plausible

gewichtete Klaffungswerte $\tilde{g}_r > 0$, $r \in \mathcal{S}$, an den Slave-Knoten. Im Gegensatz hierzu muss in Bezug auf quadratische Finite-Elemente-Diskretisierungen der auf dem gesamten Elementgebiet stets nicht-negative Kurvenverlauf für $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, welcher noch bei sämtlichen linearen Standardansätzen vorlag, aufgegeben werden, d. h. $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \not\geq 0$. Diese Konstellation spitzt sich noch weiter zu, indem nur 3-knotige quadratische Kontaktlinienelemente (Lin3) und 9-knotige quadratische Viereck-Oberflächenfacetten (Quad9) die Einhaltung des Kriteriums der integralen Positivität (5.404) bestätigen und damit, wie exemplarisch Abb. 5.19b für eine Gebietszerlegung mit Quad9-Elementen zeigt, zur Generierung von positiven gewichteten Abstandsfunktionswerten $\tilde{g}_r > 0$, $r \in \mathcal{S}$, führen. Für einige lokale Knoten der verbleibenden Oberflächenfacettenformen mit biquadratischen Ansätzen, d. h. 6-knotige quadratische Dreieck- (Tri6) und 8-knotige quadratische Viereck-Interface-Elemente (Quad8), kann die Minimalanforderung (5.404) nicht aufrechterhalten werden, siehe z. B. Abb. 5.19c. So ist es beispielsweise möglich anhand einer unverzerrten Elementgeometrie zu zeigen, dass die Eckknoten einer Tri6- bzw. Quad8-Facetten das aufgestellte Kriterium der integralen Positivität (5.404) verletzen, siehe hierzu auch [Popp, 2012].

Ein weiterer Aspekt, den es bei der Verwendung von Standard-Lagrange-Multiplikatoren zu berücksichtigen gilt, ist der Verlust der lokalen Trägereigenschaft der Formfunktionen Ξ_r , $r \in \mathcal{S}$, infolge der im Rahmen der Mortar-Methode angestrebten integralen Formulierung der Interface-Kopplungsbedingungen, siehe z. B. auch [Hauret und Le Tallec, 2007]. Bei Betrachtung einer äquivalenten nicht-konformen positiv definiten Mortar-Methode mit einem direkt durch die Kontaktbedingungen beschränkten Lösungsraum demonstrieren [Wohlmuth, 2000; Wohlmuth, 2001; Lamichhane und Wohlmuth, 2007], dass die auf der Slave-Seite konstruierte Lösungsbasis nicht länger über die Eigenschaft der Lokalität verfügt. Für eine eingängigere Darstellung im Kontext eines ingenieurwissenschaftlichen Hintergrunds sei auf [Wriggers, 2006, S. 211–224] verwiesen. Dieser Sachverhalt wird zudem algorithmisch durch eine konsistente Massenmatrix ähnliche Struktur für die Kopplungsmatrix $\hat{\mathbf{D}}$ und deren dicht besetzten Inversen $\hat{\mathbf{D}}^{-1}$ reflektiert. Die Freiheitsgrade eines Slave-Knotens $r \in \mathcal{S}$ sind hierdurch an sämtliche Informationen auf der Master-Oberfläche $\gamma_c^{h(2)}$ gekoppelt. Statische Kondensationsoperationen zur Eliminierung der diskreten Lagrange-Multiplikatoren sind somit für moderate Systemgrößen hinsichtlich numerischer Effizienz und Speicherbedarf in keinem vertretbaren Aufwand durchführbar. Mit Hilfe der im nächsten Abschnitt vorgestellten dualen Formfunktionen ist es allerdings möglich, einen statischen Kondensationsalgorithmus zu implementieren, welcher durch das Entfernen der mit dem Lagrange-Multiplikatorfeld assoziierten Freiheitsgrade zu einer erheblichen Vereinfachung des diskreten Sattelpunktproblems beiträgt.

5.5.4.2 Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation

Im folgenden Abschnitt werden sogenannte duale Ansatzfunktionen, welche erstmals in [Scott und Zhang, 1990; Wohlmuth, 2000] angewendet wurden, zur Interpolation des Lagrange-Multiplikatorfeldes $\boldsymbol{\lambda}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)$ und der Variation $\delta \boldsymbol{\lambda}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)$ herangezogen. Die Motivation zur Verwendung einer solchen Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation liegt darin begründet, dass bei einer durch die Mortar-Projektionen induzierten

Kopplung von einem master-seitigen Freiheitsgrad an die Slave-Seite sämtliche Standard-Lagrange-Multiplikatoren involviert sind. Die entsprechende, im globalen Interfaceknoten $t \in \mathcal{M}$ definierte Basisfunktion $N_t^{(2)}(\mathbf{x}^{h(2)})$ verliert damit ihre lokalen Trägereigenschaften. Um dieses der als Sattelpunktproblem formulierten Mortar-Methode anhaftende Defizit zu beseitigen, schlagen Wohlmuth [2000] und Wohlmuth [2001] eine alternative Wahl für den diskreten Lagrange-Multiplikator-Lösungsraum basierend auf dualen Formfunktionen vor. Mit Hilfe der Konstruktion solcher dualer Ansatzräume gelingt es nun, die Lokalität der diskreten Basisfunktionen zu konservieren, sodass die Kopplungen nur noch in lokalisierten Bereichen auf dem Interface stattfinden. Der geschilderte Sachverhalt wird algebraisch durch eine Diagonalisierung der Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}$ charakterisiert. Diese Begleiterscheinung ermöglicht jedoch auch die Anwendung einer sehr effizienten statischen Kondensationsoperation zur Eliminierung aller diskreten Lagrange-Multiplikatoren im linearisierten Gleichungssystem. Gleichzeitig wird z. B. im Fall der Elastizität die unerwünschte Sattelpunktstruktur durch eine symmetrische, positiv definite Funktionalmatrix ersetzt.

Bevor die grundlegenden Konzepte genauer erläutert werden, sei vorab für weitere Details zur Thematik der Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation in Verbindung mit Interfaceproblemen auf die umfangreiche Literatur verwiesen, siehe [Wohlmuth, 2000; Kim et al., 2001; Wohlmuth, 2001; Lamichhane und Wohlmuth, 2002; Puso und Laursen, 2003; Puso, 2004; Lamichhane et al., 2005; Hübner und Wohlmuth, 2005; Flemisch und Wohlmuth, 2007; Lamichhane und Wohlmuth, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann, 2007; Hübner et al., 2008; Hartmann und Ramm, 2008; Hübner, 2008; Hübner und Wohlmuth, 2009; Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Gitterle et al., 2010; Cichosz und Bischoff, 2011; Popp, 2012; Gitterle, 2012; Hammer, 2012]. Die in den nachfolgenden Ausführungen angegebene Herleitung der dualen Ansatzfunktionen lehnt sich stark an die Darstellungen in [Popp, 2012] an.

Ausgangspunkt für die Konstruktion dualer Ansatzfunktionen Ξ_r , $r \in \mathcal{S}$, bildet die sogenannte Biorthogonalitätsbedingung

$$\int_{\gamma_c^{h(1)}} \Xi_r N_s^{(1)} d\gamma = \delta_{rs} \int_{\gamma_c^{h(1)}} N_s^{(1)} d\gamma \quad \text{für } r, s \in \mathcal{S}, \quad (5.408)$$

mit dem Kronecker-Delta

$$\delta_{rs} = \begin{cases} 1 & \text{falls } r = s \\ 0 & \text{falls } r \neq s \end{cases},$$

siehe auch [Wohlmuth, 2000; Wohlmuth, 2001; Hübner und Wohlmuth, 2005]. Wie ebenfalls Wohlmuth [2000] hervorhebt, wird durch die Biorthogonalitätsbedingung (5.408) die Beobachtung reflektiert, dass die Lagrange-Multiplikatoren Spannungsvektoren im Kontakt-Interface repräsentieren. Darüber hinaus ist die Erfüllung der Biorthogonalitätsbedingung (5.408) Voraussetzung dafür, dass die globale Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}$ eine Diagonalstruktur besitzt, sodass Gl. (5.408) auch als eine Art Diagonalisierungstechnik, welches in der englischsprachigen Literatur als „lumping“ Erwähnung findet, interpretiert werden kann. Ein trivialer Vergleich der beiden Ausdrücke (5.312) und (5.408) beweist die zuvor aufgestellte Behauptung. Im Rahmen des iterativen Lösungsprozesses ermöglicht

die so konzentrierte Kopplungsmatrix $\hat{\mathbf{D}}$ die Implementation einer einfachen statischen Kondensation zur Eliminierung der diskreten Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgrade.

Aus technischen Gesichtspunkten wird die Erfüllung der Biorthogonalitätsbedingung im physikalischen Raum, siehe Gl. (5.408), lediglich auf dem Gebiet $\gamma^{e(1)}$ gefordert. In der vorliegenden Arbeit wird stets davon ausgegangen, dass alle lokalen Knoten $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ eines Slave-Elements e_S , $e_S \in \mathcal{E}_S$, sowohl mit Verschiebungs- als auch mit Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgraden ausgestattet sind. Dies impliziert $\hat{n}_{\text{en}}^{(1)} = n_{\text{en}}^{(1)}$. Bezogen auf ein slave-seitiges Oberflächenelement e_S lautet die lokale Formulierung der Biorthogonalitätsbedingung

$$\int_{\gamma^{e(1)}} \Xi_a N_b^{(1)} d\gamma^{e(1)} = \delta_{ab} \int_{\gamma^{e(1)}} N_b^{(1)} d\gamma^{e(1)} \quad \text{für } a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}. \quad (5.409)$$

Die aus der lokalen Version (5.409) resultierenden und sich auf die Facette e_S beziehenden dualen Formfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, weisen denselben Polynomgrad \hat{p}_λ wie die Standardansatzfunktionen $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, auf, d. h. $\hat{p}_\lambda = \hat{p}^{(1)}$. Außerdem zeigen Flemisch und Wohlmuth [2007], dass als weiteres direktes Resultat aus der Gewährleistung von Gl. (5.409) die Konsistenzbedingung

$$\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} \Xi_a = 1 \quad \forall \xi^{(1)} \in \Omega_{\square}^{(1)} \quad (5.410)$$

entspringt.¹²⁹ Wie Abb. 5.20b schematisch für den zweidimensionalen Fall zeigt, handelt es sich bei Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, um diskontinuierliche Ansatzfunktionen. Die Verletzung der Kontinuität an den Übergängen zwischen benachbarten Elementen hat zur Folge, dass die globale Reproduktionsordnung \hat{r}_λ einer diskreten Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation zu $\hat{r}_\lambda = 0$ reduziert wird. Der mit Hilfe der dualen Formfunktionen konstruierte Lösungsraum \mathcal{M}_λ^h ist also lediglich in der Lage, konstante Kontaktspannungszustände (konstante Polynome) auf dem Interface abzubilden. Trotz Präsenz dieser nachteilig erscheinenden Eigenschaft bleiben die Erfüllung der LBB-Stabilitätsbedingung sowie die gleichen a priori Abschätzungen für eine optimale räumliche Konvergenzrate, wie bereits in Abschnitt 5.5.4.1 angegeben, bestehen, siehe hierzu z. B. [Popp, 2012] und die dort zitierte Literatur. Außerdem sollten die dualen Ansatzfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, mit derselben Begründung wie schon in Abschnitt 5.5.4.1, nämlich zur Generierung von physikalisch plausiblen gewichteten Klaffungswerten \tilde{g}_r , $r \in \mathcal{S}$, bei ebenen gegenüberliegenden Kontaktoberflächen, vgl. Abb. 5.19, das Kriterium der integralen Positivität (5.404)₂ einhalten. Unter Beachtung der Konsistenzbedingung (B.6) für $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, d. h. $\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)} = 1$, und Kombination mit der Biorthogonalitätsaussage (5.409) folgt das direkte Resultat

$$\int_{\gamma^{e(1)}} \Xi_a d\gamma^{e(1)} = \int_{\gamma^{e(1)}} N_a^{(1)} d\gamma^{e(1)} \quad \text{für } a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}, \quad (5.411)$$

¹²⁹Im Gegensatz zu den auf Basis von Lagrange-Polynomen konstruierten klassischen Ansatzfunktionen folgt die Konsistenzbedingung (5.410) für die dualen Formfunktionen nicht aus der Gewährleistung des Kriteriums der Vollständigkeit, siehe Abschnitt B.1. Dieser Plausibilitätstest wird von den dualen Formfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, nicht erfüllt.

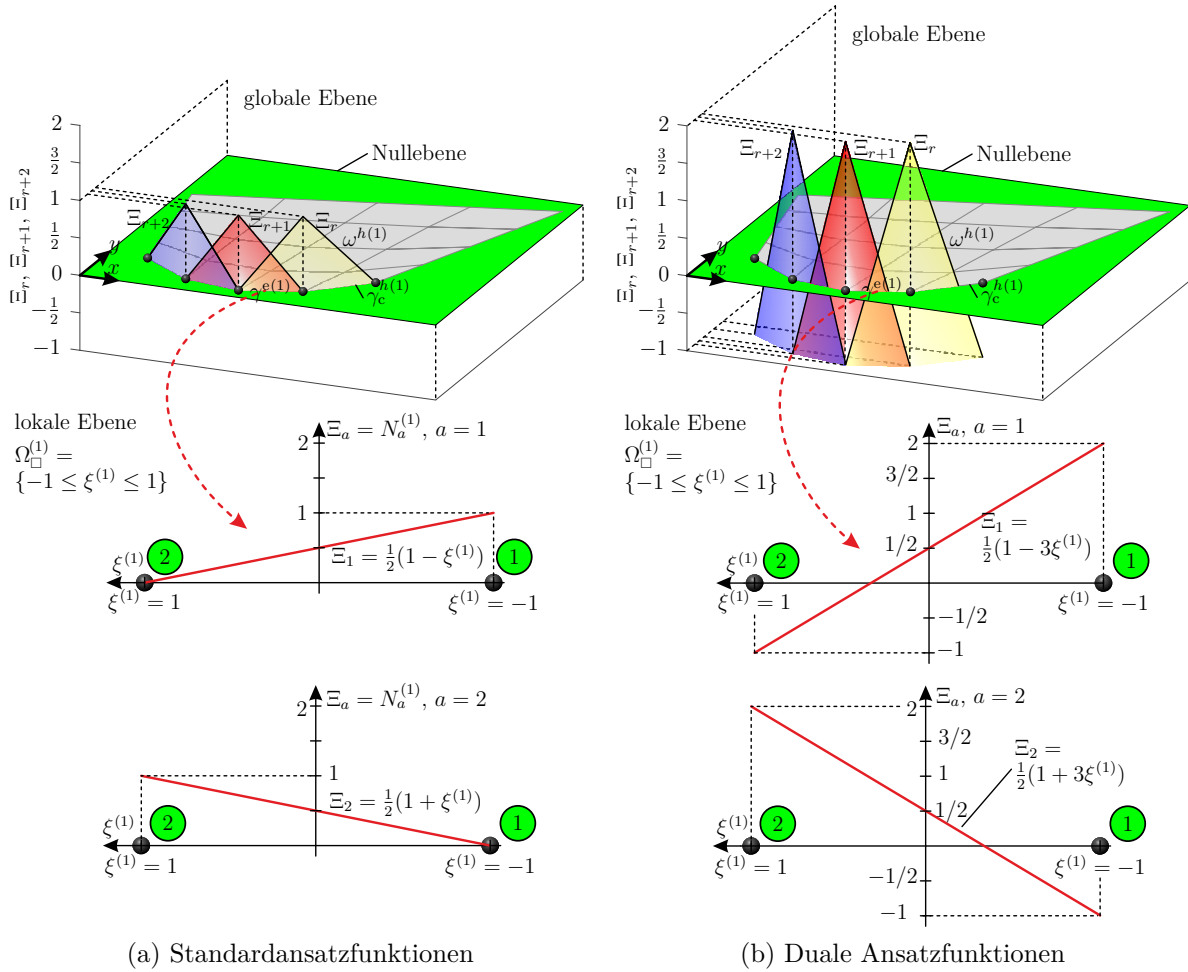


Abbildung 5.20: Gegenüberstellung der Standard-Lagrange-Multiplikator und Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolationsansätze für eine mit 2-knotigen Linien-Elementen (Lin2) diskretisierte Slave-Oberfläche in 2D

sodass die vereinnahmte Minimalanforderung

$$\int_{\gamma^{e(1)}} \Xi_a \, d\gamma^{e(1)} > 0 \quad \text{unmittelbar aus} \quad \int_{\gamma^{e(1)}} N_a^{(1)} \, d\gamma^{e(1)} > 0 \quad (5.412)$$

hervorgeht. Damit liegt hinsichtlich der Erfüllung von Gl. (5.412)₁ eine absolut identische Konstellation wie in Abschnitt 5.5.4.1 vor. Mit Ausnahme von 6-knotigen quadratischen Dreieck- (Tri6) und 8-knotigen quadratischen Viereck-Interface-Elementen (Quad8) gewährleisten also auch die dualen Lagrange-Multiplikator Interpolationsansätze der verbleibenden Elementtypen das Kriterium der integralen Positivität. Für die zuerst genannten Elementformen sind spezielle Modifikationen notwendig, welche Gegenstand in Abschnitt 5.5.4.3 sind. Die Prämisse in Form eines nicht-negativen Kurvenverlaufs, $\Xi_a \geq 0$ für Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, kann hier nicht aufrechterhalten werden.

Elementbezogene Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen Zur algorithmischen Umsetzung der elementweisen Version (5.409), mit dem Ziel der Konstruktion von Ξ_r an jedem Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$, wird für die dualen Ansatzfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, im Slave-Element e_S gemäß Lamichhane und Wohlmuth [2002], Flemisch und Wohlmuth [2007] und Hartmann et al. [2007] der Ansatz

$$\Xi_a = \sum_{b=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} a_{ab}^e N_b^{(1)} \quad \text{bzw. in matrizieller Form} \quad \begin{Bmatrix} \Xi_1 \\ \vdots \\ \Xi_{n_{\text{en}}^{(1)}} \end{Bmatrix} = \mathbf{A}^e \begin{Bmatrix} N_1^{(1)} \\ \vdots \\ N_{n_{\text{en}}^{(1)}}^{(1)} \end{Bmatrix} \quad (5.413)$$

gemacht. Die Substitution dieser Linearkombination von slave-seitigen Standardansatzfunktionen in Gl. (5.409) liefert auf Elementebene durch Lösung des Massenmatrix ähnlichen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^e \mathbf{M}^e &= \mathbf{D}^e \Leftrightarrow \mathbf{A}^e = \mathbf{D}^e \mathbf{M}^{e-1}, \quad \text{mit} \\ \mathbf{D}^e &= [d_{ab}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}, \quad d_{ab}^e = \delta_{ab} \int_{\gamma^{e(1)}} N_a^{(1)} \, d\gamma^{e(1)}, \\ \mathbf{M}^e &= [m_{ab}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}, \quad m_{ab}^e = \int_{\gamma^{e(1)}} N_a^{(1)} N_b^{(1)} \, d\gamma^{e(1)}, \end{aligned} \quad (5.414)$$

die zum Aufstellen von Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, benötigte deformationsabhängige Koeffizientenmatrix $\mathbf{A}^e = [a_{ab}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$. Die Integration der elementbezogenen Matrizen $\mathbf{D}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ und $\mathbf{M}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ wird üblicherweise im Parameterraum des Elements $\Omega_{\square}^{(1)} \subset \mathbb{R}^2$ unter Zuhilfenahme der Determinante $\det \mathbf{j}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \|\boldsymbol{\chi}_{t,\xi}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \times \boldsymbol{\chi}_{t,\eta}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})\|$ der Jacobi-Matrix $\mathbf{j}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \text{Grad}_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}_t^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ durchgeführt. Im zweidimensionalen Fall gilt $\det \mathbf{j}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \|\boldsymbol{\chi}_{t,\xi}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})\|$, mit $\mathbf{j}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \text{Grad}_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}_t^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \boldsymbol{\chi}_{t,\xi}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$. Die Anwendung einer ausreichend exakten numerischen Quadratur,

charakterisiert durch $n_{\text{GP}}^{e(1)}$ Kollokationspunkte $\boldsymbol{\xi}_k^{(1)} = \{\xi_k^{(1)}, \eta_k^{(1)}\}^T$ sowie entsprechende Wichtungsfaktoren w_k , führt auf

$$\mathbf{D}^e(\mathbf{u}^{e(1)}) = [d_{ab}^e], \quad d_{ab}^e = \delta_{ab} \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^{e(1)}} w_k N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_k^{(1)}) \det \mathbf{j}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}_k^{(1)}), \quad (5.415)$$

$$\mathbf{M}^e(\mathbf{u}^{e(1)}) = [m_{ab}^e], \quad m_{ab}^e = \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^{e(1)}} w_k N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_k^{(1)}) N_b^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_k^{(1)}) \det \mathbf{j}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}_k^{(1)}). \quad (5.416)$$

Die in den Gl. (5.415) und (5.416) explizit gekennzeichnete Deformationsabhängigkeit von den lokalen diskreten Verschiebungen $\mathbf{u}^{e(1)} \in \mathbb{R}^{n_u^{e(1)}}$, $n_u^{e(1)} = 3 \times n_{\text{en}}^{(1)}$, für die Matrizen $\mathbf{D}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ und $\mathbf{M}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ resultiert aus der Auswertung der Biorthogonalitätsbedingung (5.409) im physikalischen Raum der Momentankonfiguration. Konsequenterweise hängen ebenfalls die Koeffizientenmatrix $\mathbf{A}^e(\mathbf{u}^{e(1)})$ und die sich gemäß der Vorschrift (5.413) ergebenden, dualen Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \mathbf{u}^{e(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, vom Verformungszustand im Element ab. Zur Vereinfachung der Schreibweise werden im Folgenden diese Abhängigkeiten nur falls erforderlich mitgeführt. Für einige Oberflächenelementtypen mit linearer Interpolationsordnung, hierunter fallen das 2-knotige lineare Linien-Element (Lin2) im \mathbb{R}^2 und die 3-knotige lineare Dreieck-Facette (Tri3) im \mathbb{R}^3 , ist die Jacobi-Determinante nicht veränderlich, sodass a priori analytische Ausdrücke für die dualen Formfunktionen mit einer konstanten Koeffizientenmatrix \mathbf{A}^e existieren. Abb. 5.20b konkretisiert die dualen Ansatzfunktionen exemplarisch für eine mit 2-knotigen Linien-Elementen (Lin2) diskretisierte Slave-Oberfläche. Die Aussage behält weiterhin ihre Gültigkeit für unverzerrte, regelmäßige Vernetzungen, auf denen die Determinante der Jacobi-Matrix ebenfalls in eine Konstante, d. h. $\det \mathbf{j}^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = \text{const.}$, übergeht. Die zugehörigen analytischen Ausdrücke für solche vorab bestimmmbaren, dualen Basisfunktionen sowie für die Ausnahmefälle, welche sich im Kontext einer unverzerrten Elementgeometrie abzeichnen, werden im Anhang C.3 eingehender diskutiert. Im Rahmen eines allgemeinen Szenarios müssen jedoch diese Ansatzfunktionen gemäß der beschriebenen Vorgehensweise, d. h. Lösung des linearen Gleichungssystems (5.414) nach $\mathbf{A}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ und Einsetzen der Koeffizientenmatrix \mathbf{A}^e in den Ansatz (5.413), berechnet werden. Weitere Details zur Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen in Verbindung mit einer mathematisch fundierten Theorie sind [Wohlmuth, 2001; Hieber und Wohlmuth, 2005; Flemisch und Wohlmuth, 2007; Hieber et al., 2008; Hieber und Wohlmuth, 2009] zu entnehmen.

Segmentbasierte Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen In einigen Situationen verfügt die Verwendung dualer Ansatzräume zur Interpolation der Lagrange-Multiplikatoren nicht über dieselbe Robustheit und Stabilität wie im Vergleich zu einer auf Standardansatzfunktionen basierenden Interpolation. Algorithmische Schwierigkeiten bereitet die konsistente Definition der Biorthogonalitätsbedingung (5.409) und die hierdurch induzierte Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen auf partiell integrierten Slave-Elementen. Die bislang im vorherigen Paragraph vorgestellte Strategie ging bei

der Erzeugung der dualen Formfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, stets davon aus, dass der aus sämtlichen Slave-Elementen aggregierte Interfacebereich $\gamma_c^{h(1)} = \tilde{\gamma}_c^{h(1)}$ vollständig an den Kontaktinteraktionen teilnimmt. An den Übergängen zwischen kontaktierenden und nicht kontaktierenden Bereichen von $\gamma_c^{h(1)}$ ist diese Voraussetzung jedoch gegebenenfalls nicht mehr erfüllt. Werden im Verlauf der globalen Kontaktsuche bzw. mittels des Mortar-Projektionsalgorithmus Bereiche auf der Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ ausgeschlossen, resultieren mit großer Wahrscheinlichkeit nicht vollständig überdeckte Facettengebiete $\tilde{\gamma}^{e(1)} \subset \gamma^{e(1)}$. Die durch die slave-seitigen Elementgebiete $\tilde{\gamma}^{e(1)}$, $e = 1, \dots, \tilde{n}_c^{e(1)}$, welche jetzt nur noch partiell an der Integration im Interface teilnehmen, aggregierte Kontaktzone $\tilde{\gamma}_c^{h(1)}$ entspricht damit nur noch einem Teilgebiet von $\gamma_c^{h(1)}$, d. h. $\tilde{\gamma}_c^{h(1)} \subset \gamma_c^{h(1)}$. Abb. 5.13a veranschaulicht die beschriebene Situation, indem ein nicht im Kontakt befindendes Teilstück der facettierten Slave-Oberfläche über die gegenüberliegende Master-Seite $\gamma_c^{h(2)}$ hinausragt, also keinerlei Überdeckung mit $\gamma_c^{h(2)}$ aufweist. Wie Cichosz und Bischoff [2011], Popp et al. [2013] und Farah et al. [2015] zeigen, entsteht bei Präsenz solcher Rahmenbedingungen ein Konflikt aufgrund der Ausnutzung unterschiedlicher Integrationsbereiche beim Aufstellen der mortar-basierten Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}$ und $\hat{\mathbf{M}}$ und dualen Ansatzfunktionen. Während die globalen Mortar-Matrizen $\hat{\mathbf{D}}$ und $\hat{\mathbf{M}}$ auf den durch den zwei- bzw. dreidimensionalen Segmentierungsalgorithmus detektierten Integrationsgebieten, die sich als Resultat zulässiger Mortar-Projektionen manifestieren, berechnet werden, stützt sich die Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen mit Hilfe der lokalen Biorthogonalitätsbedingung (5.409) auf eine Integration über die gesamte Slave-Elementfläche. Diese Inkonsistenz führt dazu, dass die Diagonalstruktur von $\hat{\mathbf{D}}$ verloren geht und die vorgestellte mortar-basierte Finite-Elemente-Formulierung ihre herausragende Eigenschaft der einfachen statischen Kondensation für die diskreten Lagrange-Multiplikatoren einbüßt.

Abhilfe für dieses Problem schafft der von Cichosz und Bischoff [2011] in 2D und der von Popp et al. [2013] in 3D unterbreitete Vorschlag, den Integrationsbereich für die lokale Version der Biorthogonalitätsbedingung (5.409) auf das tatsächliche von jedem Slave-Element an den Kontaktinteraktionen involvierte Gebiet zu beschränken. Nach Anpassung des Integrationsbereichs geht Gl. (5.409) in den Ausdruck

$$\int_{\tilde{\gamma}^{e(1)}} \Xi_a N_b^{(1)} d\gamma^{e(1)} = \delta_{ab} \int_{\tilde{\gamma}^{e(1)}} N_b^{(1)} d\gamma^{e(1)} \quad \text{für } a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)} \quad (5.417)$$

über. Für die Realisierung der modifizierten Form (5.417) werden die in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 vorgestellten mortar-basierten Segmentierungsstrategien herangezogen. Die im dreidimensionalen Fall zur Zerlegung eines Slave-Master-Elementpaares $(e_S, e_M) \in \mathcal{E}_c$ in Integrationszellen notwendigen Arbeitsschritte, bestehend aus Projektion, Detektion der Überlappungsbereiche und Triangulierung, siehe Algorithmus 5.1, werden wiederholt auf ein einzelnes Slave-Element e_S angewendet um alle zugehörigen $n_{\text{cells}}^{e_S} = \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{e_S}} n_{\text{cell}}$ Integrationszellen und damit den näherungsweise, tatsächlich von der Oberflächenfacette e_S eingefassten Integrationsbereich

$$\tilde{\gamma}^{e(1)} = \bigcup_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{e_S}} \gamma_p^{\text{clp}}, \quad \gamma_p^{\text{clp}} = \bigcup_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \gamma_z^{\text{cell}}, \quad (5.418)$$

an der Kontaktzone $\gamma_c^{h(1)}$ zu ermitteln. Wie bereits im Abschnitt 5.5.2 dargelegt, repräsentiert im allgemeinen Fall von gekrümmten Kontaktoberflächen der in eine Hilfsebene projizierte Bereich $\tilde{\gamma}^{e(1)}$ eine geometrische Approximation an $\tilde{\gamma}^{e(1)} \subseteq \gamma^{e(1)}$. Abb. 5.21 versinnbildlicht die beschriebene Prozedur. Die Anpassung der Berechnungsvorschriften (5.415) und (5.416) für die lokalen Matrizen $\mathbf{D}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ und $\mathbf{M}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$, die aus der Erfüllung der Biorthogonalitätsbedingung resultieren, erfolgt in Form einer Gauß-Quadratur über die $n_{\text{cells}}^{\text{es}}$ Integrationszellen, welche mit dem Slave-Element e_s verknüpft sind. Gemäß der aufgeführten Aggregation (5.418) wird auch der Zusammenbau von \mathbf{D}^e und \mathbf{M}^e in einer konformen Doppelsumme über $n_{\text{clp}}^{\text{es}}$ Überschneidungspolygone, denen jeweils n_{cell} Integrationszellen zugeordnet sind, organisiert. Damit ergibt sich:

$$\mathbf{D}^e(\mathbf{u}) = [d_{ab}^e], \quad d_{ab}^e = \delta_{ab} \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{\text{es}}} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g), \quad (5.419)$$

$$\mathbf{M}^e(\mathbf{u}) = [m_{ab}^e], \quad m_{ab}^e = \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{\text{es}}} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) N_b^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \quad (5.420)$$

In den Gleichungen (5.419) und (5.420) symbolisiert $\det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g)$ die zuvor in Gl. (5.367) eingeführte konstante Jacobi-Determinante der Integrationszelle z , $z = 1, \dots, n_{\text{cells}}^{\text{es}}$. Die auf das Slave-Element e_s bezogene Koeffizientenmatrix $\mathbf{A}^e(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ bestimmt sich analog zu Gl. (5.414) aus der Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{A}^e \mathbf{M}^e = \mathbf{D}^e \Leftrightarrow \mathbf{A}^e = \mathbf{D}^e \mathbf{M}^{e-1} \quad (5.421)$$

und ist infolgedessen das Resultat aus der Durchführung der numerischen Integration auf allen mit dem Slave-Element e_s assoziierten dreieckförmigen Integrationszellen. Der Konstruktionsansatz (5.413) für $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \mathbf{u})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, wird ebenfalls unverändert übernommen. Aufgrund der zur numerischen Integration herangezogenen Mortar-Segmentdefinitionen, welche in vielfältiger Weise Korrelationen mit den Freiheitsgraden des Kontakt-Interface hervorrufen, sind nun neben der Deformationsabhängigkeit durch das Slave-Element e_s auch die Verschiebungsfreiheitsgrade der von e_s überdeckten Master-Elemente in den Berechnungsvorschriften (5.419) bis (5.421) sowie bei der Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \mathbf{u})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ involviert, siehe hierzu auch Abb. 5.21. Weiterhin rufen die zur Durchführung der Mortar-Projektionen benötigten diskreten Normalenvektoren an den Slave-Knoten von e_s zusätzliche Abhängigkeiten mit Verschiebungsfreiheitsgraden benachbarter Slave-Elemente hervor. Analog zu den Gl. (5.365) und (5.366) soll dies rein formal durch den globalen Spaltenvektor $\mathbf{u}^T = \{\mathbf{u}_N^T, \mathbf{u}_S^T, \mathbf{u}_M^T\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ angezeigt werden. Zur Vereinfachung der Schreibweise werden im Folgenden diese Abhängigkeiten nur falls erforderlich mitgeführt. Darüber hinaus offenbart die Zusammenstellung der Summationsausdrücke (5.419) und (5.420) nun endlich eine Rechtfertigung für die bereits in Abschnitt 5.5.2 gewählte Aggregationsvorschrift (5.373) mit der eine lokal orientierte und implementationsnahe Darstellung für die globalen Mortar-Operatoren $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ gelang. Der segmentbasierte Ansatz zur Konstruktion der dualen Formfunktionen ist auf diese Weise problemlos in den mortar-basierten Kopplungsalgorithmus integrierbar.

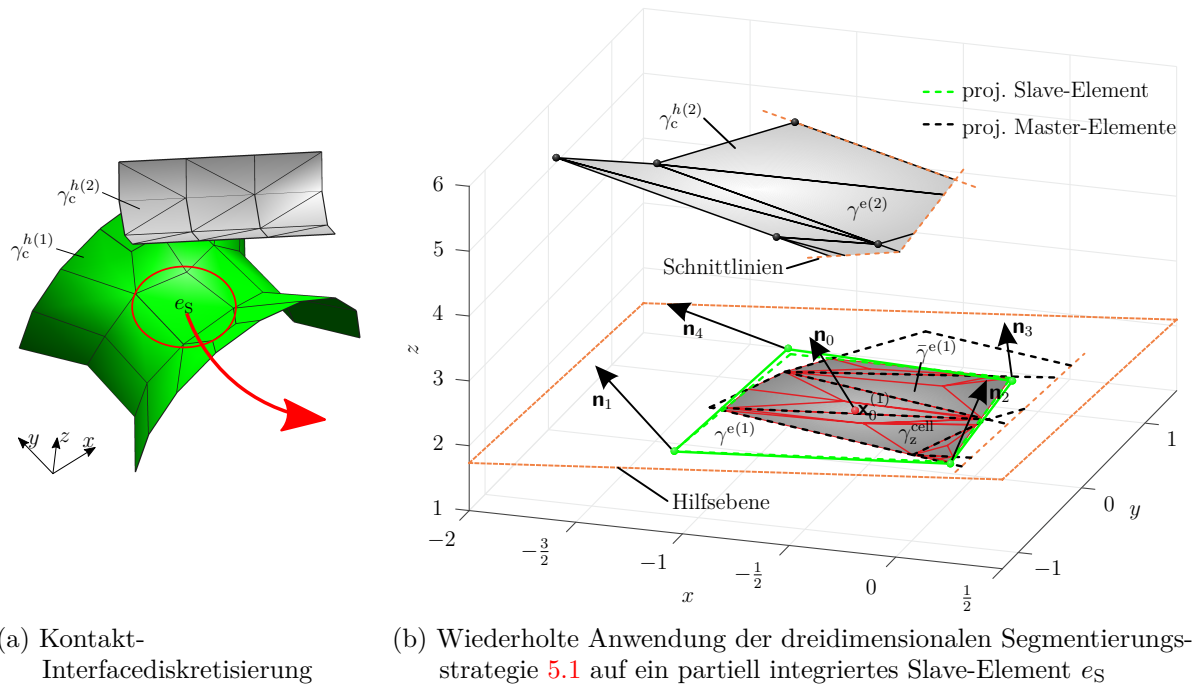


Abbildung 5.21: Detektion des Integrationsbereichs $\bar{\gamma}^{e(1)}$ in einem partiell integrierten Slave-Element e_s

Um weiterhin in partiell überdeckten Slave-Elementen zumindest das Kriterium der integralen Positivität $(5.412)_1$ für Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, zu erfüllen und damit physikalisch plausible gewichtete Klaffungswerte \tilde{g}_r , $r \in \mathcal{S}$, an den Slave-Knoten in Bezug auf das in Abb. 5.19 illustrierte Minimalbeispiel zu erhalten, sind strikt positive Ansatzfunktionen $N_a^{(1)}(\xi^{(1)}) \geq 0$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, erforderlich. Diese zusätzliche Voraussetzung ist notwendig, da beliebige Parzellen des Elements e_s nun als Integrationsbereich in den Gl. (5.419) und (5.420) auftreten können. Nur in diesem Fall kann gewährleistet werden, dass teilweise integrierte Slave-Elemente die Minimalanforderung für unilateralen Kontakt, d. h.

$$\int_{\bar{\gamma}^{e(1)}} \Xi_a d\gamma^{e(1)} > 0 \quad \text{für} \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}, \quad (5.422)$$

erfüllen, siehe auch [Popp et al., 2013]. Es ist offensichtlich, dass Interfacediskretisierungen mit linearen Interpolationsansätzen die Bedingung $N_a^{(1)}(\xi^{(1)}) \geq 0$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, garantieren, siehe hierzu die Abb. C.5, C.7 und C.8. Quadratische Oberflächenfacettenformen hingegen widersprechen symptomatisch einem nicht-negativen Kurvenverlauf, selbst nach Applikation der im Abschnitt 5.5.4.3 vorgestellten Basistransformationen, siehe hierzu auch die Abb. C.6 und C.9 bis C.11. Als Folge hiervon eignen sich prinzipiell quadratische Finite-Elemente-Diskretisierungen, deren Polynomgrad sich auf die Lagrange-Multiplikator Interpolation überträgt, nicht zur Behandlung von unilateralen Kontaktproblemen mit partiell integrierten Slave-Elementen. Diese Aussage ist sowohl für die in dem vorliegenden Abschnitt behandelte Duale-Lagrange-Multiplikator als auch

die Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation aus Abschnitt 5.5.4.1 bindend. Um dennoch eine robuste mortar-basierte Finite-Elemente-Methode mit quadratischen Elementtypen für unterschiedlichste Kontaktszenarien zu erhalten, wird im Allgemeinen die Interpolationsordnung für die Lagrange-Multiplikatoren um eine Ordnung herabgesetzt.

Ein exemplarisches Szenario zur Konstruktion der dualen Ansatzfunktion Ξ_r am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ für ein ebenes, parallel zur x - y -Ebene ausgerichtetes Kontakt-Interface zeigt Abbildung 5.22. Die Kontaktschnittstelle besteht aus vier Slave-Elementen und

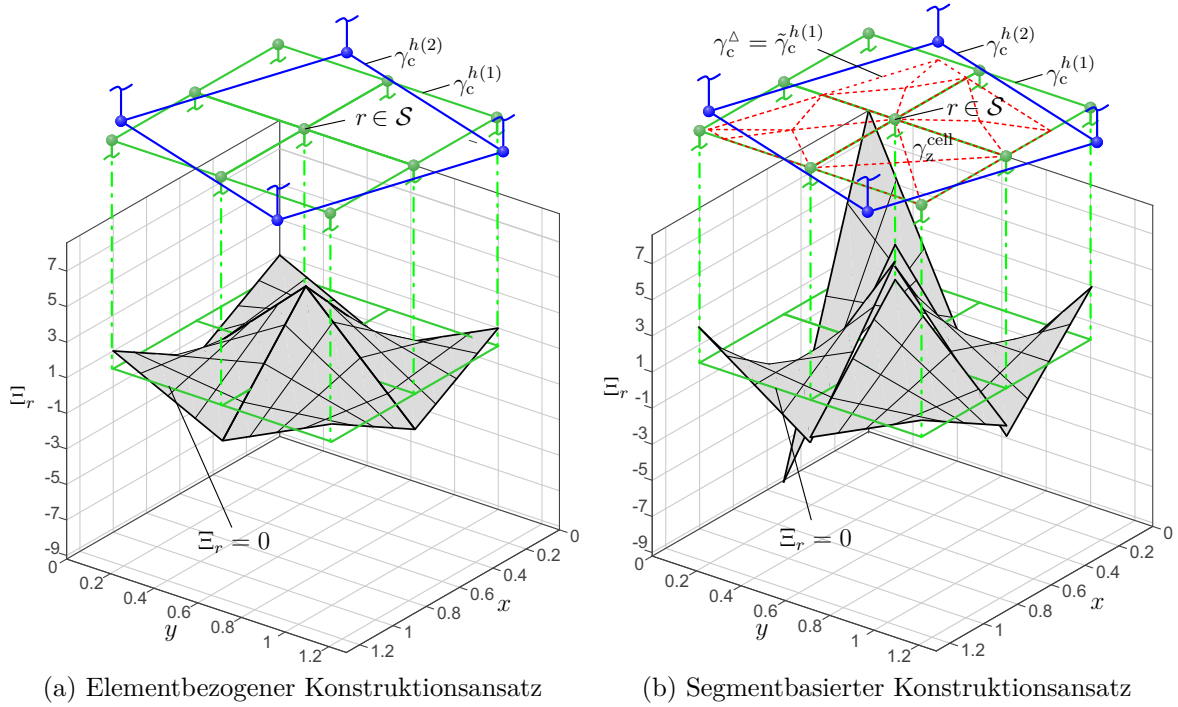


Abbildung 5.22: Gegenüberstellung der elementbezogenen und segmentbasierten Berechnungsmethodik zur Konstruktion der globalen dualen Ansatzfunktion Ξ_r am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ für eine unverzerzte, regelmäßige Vernetzung des ebenen Kontakt-Interface mit partiell integrierten Slave-Elementen

einem Master-Element, wobei das Letztere die gegenüberliegenden Elementfacetten von $\gamma_c^{h(1)}$ nicht vollständig überdeckt. Neben dem im vorliegenden Paragraphen präsentierten segmentbasierten Konstruktionsansatz für die dualen Formfunktionen, siehe Abb. 5.22b, ist auch das Resultat der elementbezogenen Konstruktionsvorschrift in Abb. 5.22a veranschaulicht. Die Unterschiede in beiden Alternativen sind eindeutig identifizierbar. Die im Rahmen der segmentbasierten Berechnungsmethode vorliegende Diskontinuität im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ ist erforderlich, um die oben erwähnte Inkonsistenz in Bezug auf partiell integrierte Slave-Elemente zu vermeiden. Bei einer vollständigen Überdeckung der Slave-Elemente durch die gegenüberliegende Master-Oberfläche $\gamma_c^{h(2)}$ liefern beide Konstruktionsmethoden für ein planares Kontakt-Interface eine absolut identische duale Ansatzfunktion Ξ_r im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$, siehe Abb. 5.23. Um das exemplarische Beispiel in Abb. 5.23 etwas allgemeiner zu halten, besteht die ebene, parallel zur x - y -

Ebene ausgerichtete Kontaktschnittstelle aus vier verzerrten Slave- und vier darüber angeordneten Master-Elementen. Auch in dieser Konstellation resultiert im Knoten $r \in \mathcal{S}$

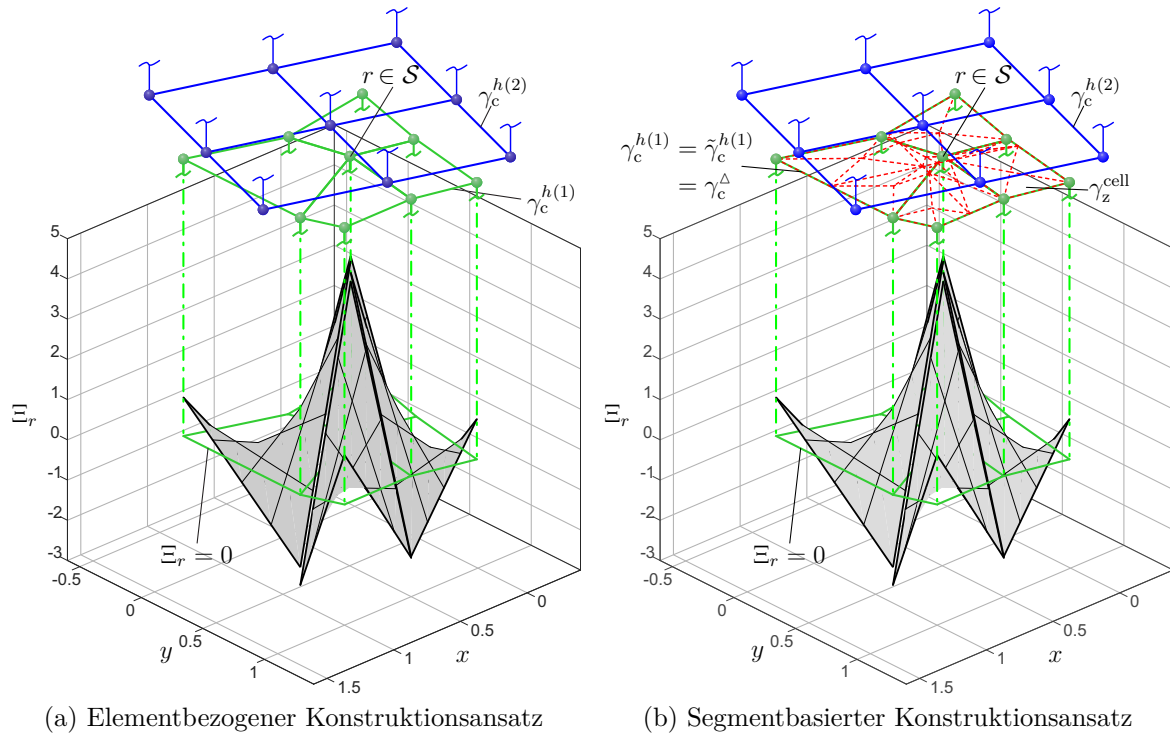


Abbildung 5.23: Gegenüberstellung der elementbezogenen und segmentbasierten Berechnungsmethodik zur Konstruktion der globalen dualen Ansatzfunktion Ξ_r am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ für ein ebenes Kontakt-Interface mit vollständig überdeckten Slave-Elementen

für die duale Basisfunktion Ξ_r eine Diskontinuität, deren Ursache allerdings jetzt der verzerrten Elementgeometrie auf $\gamma_c^{h(1)}$ zugeordnet werden muss. Würde eine regelmäßige Diskretisierung für $\gamma_c^{h(1)}$, wie in Abb. 5.22 vorliegen, tritt keine Diskontinuität auf, vgl. Abb. 5.22a.

Wie die Autoren Puso [2004], Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b] und Popp [2012] demonstrieren, kann nur unter Verwendung desselben Integrationsschemas für die zwei globalen Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ die Erhaltung des Impulses für die semidiskrete Gleichungsstruktur garantiert werden. Aufgrund dieser Argumentation findet für die globale Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}$ dasselbe numerische Quadratur-Verfahren wie für die Kopplungsmatrix $\hat{\mathbf{M}}$ auf Basis der Mortar-Segmente Anwendung. Wird diese Kopplungsstrategie mit der elementbezogenen Vorgehensweise zur Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen, wobei eine vollständige Überdeckung der Slave-Elemente vorliegen soll, kombiniert, ergibt sich für ein ebenes Kontakt-Interface eine konsistente Formulierung. Die soeben aufgestellte Behauptung ist indirekt auch aus Abb. 5.23 ersichtlich, da beide Konzepte aufgrund von $\gamma_c^{h(1)} = \tilde{\gamma}_c^{h(1)} = \gamma_c^\Delta$ zu einem identischen Ergebnis für Ξ_r , $r \in \mathcal{S}$, führen. Dies ändert sich, sobald gekrümmte Kontaktschnittstellen Betrachtung finden. Weiterhin von einer vollständigen Überdeckung

für die Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ ausgehend, gilt nun $\gamma_c^{h(1)} = \tilde{\gamma}_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(1)} \neq \gamma_c^\Delta$. Da es sich jedoch bei γ_c^Δ , siehe Gl. (5.364), um eine geometrische Approximation von $\gamma_c^{h(1)}$ handelt, werden die Berechnungen für $\hat{\mathbf{D}}$ und die dualen Ansatzfunktionen auf geometrisch nicht zueinander konformen Integrationsgebieten ausgeführt. Als Folge hiervon geht die Diagonalstruktur von $\hat{\mathbf{D}}$ verloren. Sind die Krümmungen der Kontaktoberflächen moderat, fallen die Nebendiagonalelemente von $\hat{\mathbf{D}}$ um einige Größenordnungen kleiner aus als die entsprechenden Hauptdiagonalelemente und können somit in erster Näherung vernachlässigt werden.

Anmerkung 5 Zur Sicherstellung der Konsistenz der in der vorliegenden Arbeit verwendeten mortar-basierten Kontaktformulierung wird ausschließlich auf die segmentbasierte Strategie zur Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen zurückgegriffen.

Abschließend im Zusammenhang mit dieser Problematik sei erwähnt, dass unter Missachtung der Impulserhaltung für die semidiskrete Gleichungsstruktur die Integration des globalen Mortar-Operators $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u})$ und dessen Einträge $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$, aufgrund der Stetigkeit des Integranden, auch auf $\gamma_c^{h(1)}$ ausführbar sind, siehe hierzu [Hartmann, 2007; Cichosz, 2012]. Ist zusätzlich die vollständige Überdeckung der Slave-Elemente garantiert, eignet sich prinzipiell auch der elementbezogene Konstruktionsansatz zur Definition einer konsistenten mortar-basierten Kontaktformulierung.

Unter Austausch der Segmentierungsstrategie, siehe Abschnitt 5.5.3, werden innerhalb eines zweidimensionalen Kontext in einer identischen Vorgehensweise die Einträge d_{ab}^e und m_{ab}^e für die lokalen Matrizen $\mathbf{D}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ und $\mathbf{M}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ berechnet. Nach Lokalisation der das slave-seitige Kontaktlinienelement e_s überlappenden $n_{\text{seg}}^{e_s}$ Segmente ergibt sich

$$\mathbf{D}^e = [d_{ab}^e], \quad d_{ab}^e = \delta_{ab} \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^{e_s}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g), \quad (5.423)$$

$$\mathbf{M}^e = [m_{ab}^e], \quad m_{ab}^e = \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^{e_s}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)}) N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g). \quad (5.424)$$

Für weitere Details zur Implementation eines solchen segmentbasierten Konstruktionsansatzes für die dualen Ansatzfunktionen im \mathbb{R}^2 sei auf [Cichosz und Bischoff, 2011] referiert. Die Abb. 5.24a und 5.24b illustrieren schematisch die Unterschiede in den Konstruktionsprozeduren, wobei die beiden pathologischen Fälle eines vollständig überdeckten ($e_s = 2$) und eines nicht komplett in Kontakt-Segmente zerlegbaren Slave-Elements ($e_s = 1$) abgehandelt werden. Der Überhang des rechten Linienelements auf $\gamma_c^{h(1)}$ wird durch $\alpha \in [0, 1]$ parametrisiert. Aus der Betrachtung der Funktionsverläufe für Ξ_s , $s \in \mathcal{S}$, ist ersichtlich, dass lediglich die im rechten Slave-Element ($e_s = 1$) generierten dualen Ansatzfunktionen für den elementbezogenen und segmentbasierten Konstruktionsansatz voneinander abweichen. Wie schon anhand des dreidimensionalen Beispiels aus Abb. 5.22b gezeigt, sind die Diskontinuitäten der dualen Formfunktionen am Übergang vom linken zum rechten Slave-Element in Abb. 5.24b notwendig, um die Diagonalstruktur von $\hat{\mathbf{D}}$

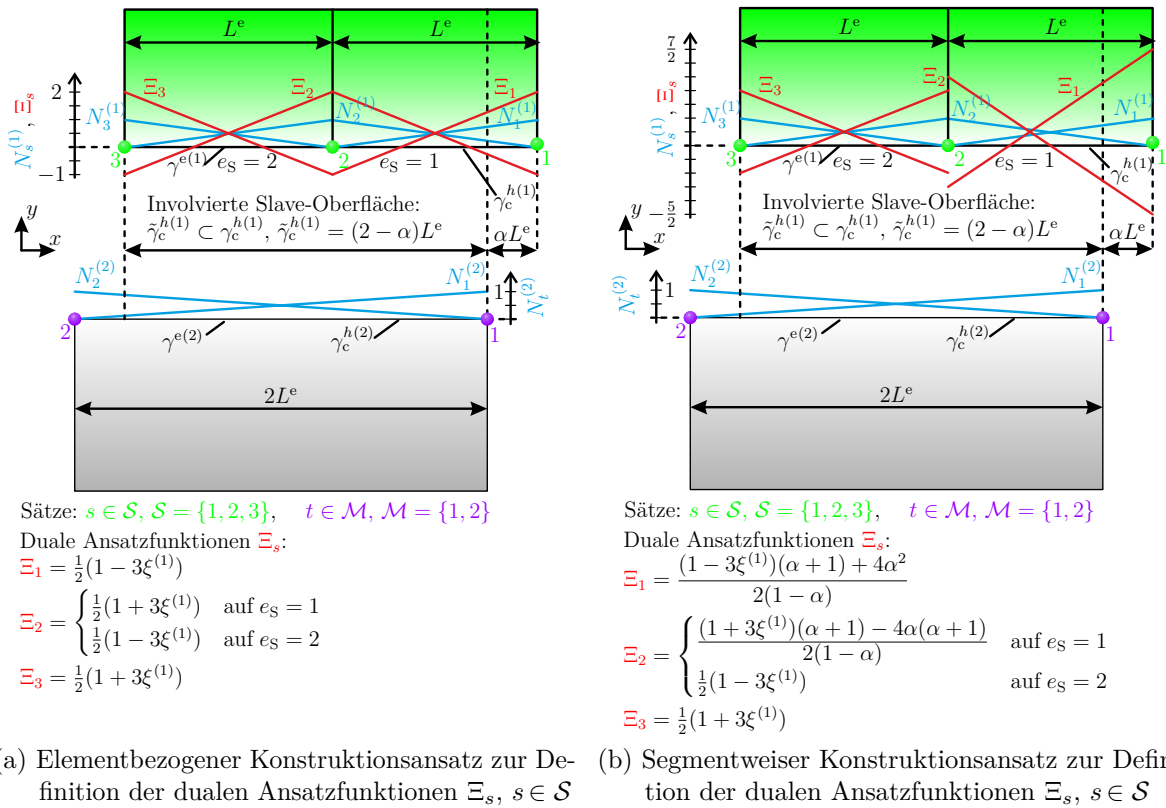


Abbildung 5.24: Gegenüberstellung der element- und segmentbasierten Konstruktionsprozeduren im \mathbb{R}^2 zur Definition der globalen dualen Ansatzfunktionen $\Xi_s, s \in \mathcal{S}$, in einem vollständig überdeckten ($e_s = 2$) und in einem nur teilweise überdeckten Slave-Element ($e_s = 1$), die illustrierten Funktionsverläufe für $\Xi_s, s \in \mathcal{S}$, in der rechten Teilabbildung sind maßstabsgerecht für einen Parameterwert $\alpha = 1/4$ gezeichnet

zu erhalten. Darüber hinaus ist durch Gewährleistung des Kriteriums der integralen Positivität (5.422) auf dem Teilbereich $\tilde{\gamma}^{e(1)} \subset \gamma^{e(1)}$ eine physikalisch plausible gewichtete Normalklaffung \tilde{g}_1 im Slave-Knoten $s = 1$ berechenbar. Der inkonsistente elementbezogene Konstruktionsansatz in Abb. 5.24a liefert dagegen für $\alpha > 1/3$ einen unbrauchbaren negativen Wert für die Knotenklaffung \tilde{g}_1 .¹³⁰ Diese kontinuumsmechanische Diskrepanz verhindert eine erfolgreiche Konvergenzsequenz der bei Kontaktproblemen angewendeten Aktiven-Mengen-Strategie, siehe Abschnitt 5.5.5 für weitere Details. Ein anschaulicher Vergleich beider Berechnungsansätze für zweidimensionale Problemstellungen ist auch in [Cichosz, 2012, S. 81–87] zu finden.

Obwohl die Robustheit und Stabilität eines mortar-basierten Kontaktalgorithmus in Verbindung mit dem segmentbasierten Konstruktionsansatz für die dualen Ansatzfunktionen wesentlich verbessert werden kann, gehen mit dieser Vorgehensweise auch einige Nachteile einher. Verkleinert sich beispielsweise infolge einer Gleitbewegung von $\gamma_c^{h(1)}$ über eine Kante von $\gamma_c^{h(2)}$ die eigentlich involvierte Kontaktzone $\tilde{\gamma}_c^{h(1)}$, induziert dies zugleich eine Reduktion in vereinzelter Einträgen der Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$. Wie Abschnitt 5.7 in aller Ausführlichkeit beschreibt, wird der Einbau der Komponenten $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, $s \in \mathcal{S}$, und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, $t \in \mathcal{M}$, in der globalen tangentialen Gesamtsteifigkeitsmatrix im Rahmen des iterativen Lösungsprozesses vollzogen. Als Folge der Assemblierung der für einige globale Knoten $s \in \mathcal{S}$ und $t \in \mathcal{M}$ verringerten Mortar-Integrale \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} resultiert eine schlechte Konditionierung des globalen linearisierten Gleichungssystems. Neben der Abnahme des Integrationsbereichs eines Slave-Elements von $\gamma^{e(1)}$ zu $\tilde{\gamma}^{e(1)}$ bzw. dem eventuell sogar vollständigem Ausschluss eines Slave-Elements ist die Verminderung in \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} auch auf die Modifikation der dualen Ansatzfunktionen in partiell integrierten Oberflächenfacetten auf $\gamma_c^{h(1)}$ zurückzuführen, sodass der segmentbasierte Konstruktionsansatz für Ξ_r , $r \in \mathcal{S}$, die Konditionierungsproblematik der tangentialen Gesamtsteifigkeitsmatrix zusätzlich anfacht. Erreicht die Konditionszahl ein kritisches Maß, ist es nicht mehr möglich, eine konvergente Lösung zu erhalten. Um dieses Verhalten zu studieren, soll exemplarisch das zweidimensionale Kontaktproblem aus Abb. 5.24b herangezogen werden. Aufgrund der sehr einfachen geometrischen Konfiguration des Interfacemodells kann die Umsetzung der Berechnungsschritte (5.397) bis (5.400) in geschlossener analytischer Form für die globalen Operatoren $\hat{\mathbf{D}}$ und $\hat{\mathbf{M}}$ in Abhängigkeit der Elementlänge L^e und des Parameters $\alpha \in [0, 1]$ erfolgen. Da der Integrationsbereich des vollständig bzw. teilweise überdeckten Slave-Elements wegen $n_{\text{seg}}^{\text{es}} = 1$ mit dem Kontakt-Segmentgebiet $\gamma_s^{\text{seg}} = \tilde{\gamma}^{e(1)}$ zusammenfällt, müssen die Kopplungsbeiträge lediglich über $\tilde{n}_c^{e(1)} = n_c^{e(1)} = 2$ Linienelemente aufsummiert werden. Unter Beachtung des trivialen Zusammenhangs $\det \mathbf{j}^{e(1)} = L^e/2$

¹³⁰Die Integration über das Teilgebiet $\tilde{\gamma}^{e(1)} \subset \gamma^{e(1)}$ liefert ab einer Überschreitung von $\alpha > 1/3$ einen negativen Wert für das Integral $m_1 = \int_{\tilde{\gamma}^{e(1)}} \Xi_1 d\tilde{\gamma}^{e(1)} < 0$, dessen Skalierung, mit der konstanten Abstandsfunktion $g^h = H = \text{const.}$, in $\tilde{g}_1 = H m_1 < 0$ mündet, vgl. mit Gl. (5.407). Obwohl nicht explizit in Abb. 5.24 gekennzeichnet, entspricht H , $H > 0$, der vertikalen Distanz zwischen beiden planaren Kontaktoberflächen.

gilt:

$$\hat{\mathbf{D}} = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \mathbf{z}_\lambda^{eT} \hat{\mathbf{D}}_{\text{seg}}^s \mathbf{z}_u^{es}, \quad \hat{\mathbf{D}}_{\text{seg}}^s = \int_{\xi_\alpha^{(1)}}^{\xi_\beta^{(1)}} \Xi_\lambda^{eT} \mathbf{N}_u^{e(1)} \det \mathbf{j}^{e(1)} d\xi^{(1)} = [\hat{\mathbf{D}}_{ab}^s], \quad (5.425)$$

$$\hat{\mathbf{D}}_{ab}^s = \hat{D}_{ab}^s \mathbf{I}_2, \quad \hat{D}_{ab}^s = \delta_{ab} \frac{L^e}{2} \int_{\xi_\alpha^{(1)}}^{\xi_\beta^{(1)}} \Xi_a N_b^{(1)} d\xi^{(1)} = d_{ab}^e \quad \text{für } a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)},$$

$$\hat{D}_{aa}^s = \begin{cases} \begin{cases} (1-\alpha)^2 \frac{L^e}{2} & \text{für } a = 1, \\ (1-\alpha^2) \frac{L^e}{2} & \text{für } a = 2, \end{cases} & \text{falls } \tilde{\gamma}^{e(1)} \subset \gamma^{e(1)} (\text{teilw. überdeckt, } e_S = 1), \\ \frac{L^e}{2} & \text{für } a = 1, 2, \end{cases} \quad \text{falls } \tilde{\gamma}^{e(1)} = \gamma^{e(1)} (\text{vollst. überdeckt, } e_S = 2), \quad (5.426)$$

$$\hat{\mathbf{M}} = \sum_{e=1}^{\tilde{n}_c^{e(1)}} \mathbf{z}_\lambda^{eT} \hat{\mathbf{M}}_{\text{seg}}^s \mathbf{z}_u^{eM}, \quad \hat{\mathbf{M}}_{\text{seg}}^s = \int_{\xi_\alpha^{(1)}}^{\xi_\beta^{(1)}} \Xi_\lambda^{eT} \mathbf{N}_u^{e(2)} \det \mathbf{j}^{e(1)} d\xi^{(1)} = [\hat{\mathbf{M}}_{ab}^s], \quad (5.427)$$

$$\hat{\mathbf{M}}_{ab}^s = \hat{M}_{ab}^s \mathbf{I}_2, \quad \hat{M}_{ab}^s = \frac{L^e}{2} \int_{\xi_\alpha^{(1)}}^{\xi_\beta^{(1)}} \Xi_a N_b^{(2)} d\xi^{(1)} \quad \text{für } a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}, \quad b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)},$$

$$\hat{M}_{ab}^s = \begin{cases} \begin{cases} -(1-\alpha)^2 \alpha \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 1, b = 1, \\ (1-\alpha)^2 (\alpha + 2) \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 1, b = 2, \\ (1-\alpha)^2 (\alpha + 1) \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 2, b = 1, \\ (1-\alpha) (\alpha + 1)^2 \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 2, b = 2, \end{cases} & \text{falls } \tilde{\gamma}^{e(1)} \subset \gamma^{e(1)} (e_S = 1) \\ \begin{cases} (1-\alpha) \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 1, b = 1, \\ (1+\alpha) \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 1, b = 2, \\ (2-\alpha) \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 2, b = 1, \\ \alpha \frac{L^e}{4} & \text{für } a = 2, b = 2, \end{cases} & \text{falls } \tilde{\gamma}^{e(1)} = \gamma^{e(1)} (e_S = 2) \end{cases} \quad (5.428)$$

Zur Konkretisierung der geschilderten Problematik sind in Abb. 5.25 die Konditionszahlen, siehe hierzu auch Abschnitt A.3, des quadratischen Mortar-Operators $\hat{\mathbf{D}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uus}} \times n_{\text{uus}}}$ sowie der Elementbeiträge $\text{cond } \hat{\mathbf{D}}_{\text{seg}}^s \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(1)}}$ und $\text{cond } \hat{\mathbf{M}}_{\text{seg}}^s \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(2)}}$ für $e_S = 1$ logarithmisch über den Geometrieparameter α dargestellt. Die Elementlänge wird dabei durch $L^e = 10^2$ mm vorgegeben. Tendiert der Überhang des rechten Slave-Elements gegen $\alpha = 1$, ist eine signifikante Verschlechterung der Kondition in den Matrizen zu beobachten. Dies ist der Tatsache geschuldet, dass die mit dem globalen Slave-Knoten $r = 1$ verknüpften Einträge gegen Null streben. Die schlechte Kondition überträgt sich dann auf das linearisierte Gleichungssystem, sodass die ursprünglich guten Konvergenzeigenschaften der iterativen Lösungsprozedur drastisch herabgesetzt werden. Abhilfe für diese unerwünschte Begleiterscheinung der segmentbasierten Mortar-Methode schafft beispielsweise eine von Popp et al. [2013] eingeführte, auf Knoten von $\gamma_c^{h(1)}$ bezogene Skalierungstechnik, welche die Größenordnung der Komponenten \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} erhält. Weitere Details hierzu werden in Abschnitt 5.9 nachgereicht.

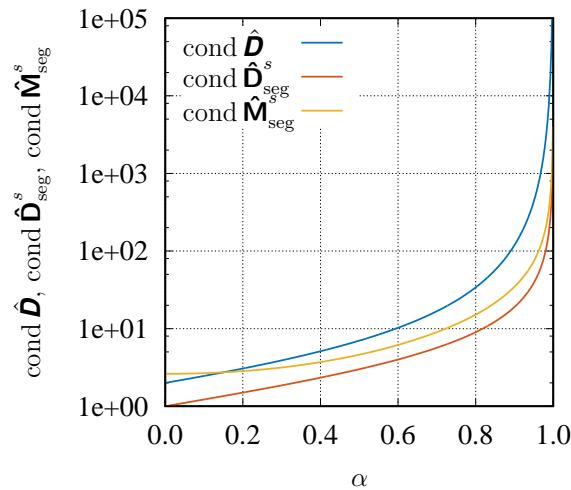


Abbildung 5.25: Entwicklung der Konditionszahl $\text{cond } \hat{\mathbf{D}}$ für die quadratische Kopplungsmatrix $\hat{\mathbf{D}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ sowie von $\text{cond } \hat{\mathbf{D}}^s_{\text{seg}}$ und $\text{cond } \hat{\mathbf{M}}^s_{\text{seg}}$, ausgewertet auf $e_s = 1$, am Beispiel des in Abb. 5.24b illustrierten Interfaceproblems in Abhängigkeit des für das partiell integrierte Slave-Element parametrisierten Überhangs $\alpha \in [0, 1]$

5.5.4.3 Lagrange-Multiplikator Interpolation mit quadratischen Interpolationsansätzen

In der vorliegenden Arbeit sollen auch höherwertige Elementformulierungen auf Basis von quadratischen Interpolationsansätzen, also $\hat{p} = 2$, zur Struktur- und Interfacediskretisierung herangezogen werden. Aus diesem Anlass folgen im nachstehenden Abschnitt noch einige Anmerkungen in Bezug auf die Approximation des Lagrange-Multiplikatorfeldes für solche Elementtypen. Im Zusammenhang mit der in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 präsentierten segmentbasierten Mortar-Kontaktformulierung haben sich prinzipiell zwei unterschiedliche Vorgehensweisen zur Interpolation der Lagrange-Multiplikatoren etabliert.

Das erste Konzept, welches jedoch in der vorliegenden Monographie keinen Einsatz findet, basiert auf einer Herabstufung des Polynomansatzes für $\boldsymbol{\lambda}^h$ und dessen Variation $\delta \boldsymbol{\lambda}^h$, d. h. $\hat{p}_{\boldsymbol{\lambda}} = \hat{p} - 1 = 1$. In einer von Puso et al. [2008] für Standardansatzfunktionen und von Popp et al. [2012] für duale Formfunktionen vorgeschlagenen Version dieser Strategie werden dabei lediglich den Eckknoten der slave-seitigen Oberflächenfacetten Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgrade zugeordnet, wodurch die im Element approximierten Interfacefelder $\boldsymbol{\lambda}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)$ und $\delta \boldsymbol{\lambda}^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t)$, siehe Gl. (5.371), im \mathbb{R}^2 durch lineare und im \mathbb{R}^3 durch bilineare Ansätze abgebildet werden. Die Einhaltung der im Verlauf von Abschnitt 5.5 aufgestellten Behauptung $n_{\boldsymbol{\lambda}}^e = n_u^{e(1)}$ bzw. $\hat{n}_{\text{en}}^{(1)} = n_{\text{en}}^{(1)}$ ist damit nicht länger gegeben und wird durch $n_{\boldsymbol{\lambda}}^e < n_u^{e(1)}$ bzw. $\hat{n}_{\text{en}}^{(1)} < n_{\text{en}}^{(1)}$ abgelöst. In einer alternativen Version dieser Strategie nutzten Puso et al. [2008] die linearen Standardansatzfunktionen $N_a^{\text{sub}\beta(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{\text{sub}\beta(1)}$, $\beta = 1, \dots, n^{\text{sub}(1)}$, der Untersegmente, die aus einer definierten Unterteilung der quadratischen Oberflächenfacetten hervorgehen, siehe Abschnitt 5.5.2, zur Interpolation von $\boldsymbol{\lambda}^h$ und $\delta \boldsymbol{\lambda}^h$ aus. Obwohl eine Reduktion der Interpolationsordnung

für das lokal approximierte Lagrange-Multiplikatorfeld in den Untersegmenten zu $\hat{p}_\lambda = \hat{p} - 1 = 1$ stattfindet, gilt für diese Konstellation aufgrund der Beteiligung sämtlicher lokaler Knoten an der elementbezogenen Zerlegung, siehe Abb. 5.14, weiterhin $n_\lambda^e = n_u^{e(1)}$ bzw. $\hat{n}_{\text{en}}^{(1)} = n_{\text{en}}^{(1)}$. Eine entsprechende Adaption dieses Konzepts auf duale Ansätze innerhalb der linear interpolierten Teilsegmente wurde nach Wissen des Autors der vorliegenden Monographie noch nicht veröffentlicht.

Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit verfolgte Vorgehensweise bei der Behandlung von quadratischen Interfacediskretisierungen stützt sich auf eine Interpolation, bei welcher im Slave-Element der Polynomgrad des approximierten Verschiebungs- und des Lagrange-Multiplikatorfeldes identisch sind, d. h. $\hat{p}_\lambda = \hat{p} = 2$. Dies hat zur Folge, dass sämtliche Elemente der Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ mit einer identischen Anzahl von Verschiebungs- und Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgraden, d. h. $n_\lambda^e = n_u^{e(1)}$, ausgestattet sind. Wie bereits in den vorherigen Teilen des Abschnitts 5.5.4 dargelegt, bedingt solch eine Umsetzung auch einige Schwierigkeiten.

So eignen sich in erster Linie für eine Interpolation von $\boldsymbol{\lambda}^h$ und $\delta\boldsymbol{\lambda}^h$ mit Standardansatzfunktionen lediglich das quadratische 3-knotige Kontaktlinienelement (Lin3) sowie das biquadratische 9-knotige Viereck-Element (Quad9). Da die Einhaltung des Kriteriums der integralen Positivität (5.404) von den vorbezeichneten Elementtypen garantiert wird, sind für das in Abb. 5.19 dargestellte eindeutige Nichtdurchdringungsszenario physikalisch plausible, gewichtete Klaffungswerte $\tilde{g}_r > 0$, $r \in \mathcal{S}$, an allen Slave-Knoten von $\gamma_c^{h(1)}$ generierbar. Im Rahmen einer Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation übertragen sich aufgrund der Gültigkeit der mit der Biorthogonalitätsbedingung (5.409) verknüpften Äquivalenzaussage (5.411) die günstigen Eigenschaften von $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, auf die dualen Formfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$. Damit sind die Konzepte aus den Abschnitten 5.5.4.1 und 5.5.4.2 ohne Modifikationen auf mit Lin3- bzw. Quad9-Elementen diskretisierte Interface-Oberflächen applizierbar.

Im Gegensatz hierzu sind das 6-knotige quadratische Dreieck- (Tri6) und das 8-knotige quadratische Viereck-Interface-Element (Quad8) nicht ohne Anpassungen zur Behandlung von unilateralen Kontaktproblemen anwendbar. Mit der Nichteinhaltung der an unilaterale Kontaktprobleme gestellten Minimalanforderung (5.404)₁ für die verschiebungsbezogenen Ansatzfunktionen $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, an einigen lokalen Knoten des Slave-Elements ist es ausgeschlossen, eine sinnvolle Skalierung durch $\Xi_a = N_a^{(1)}$ in Gl. (5.324) bzw. Gl. (5.406) vorzunehmen. Es ist einfach zu zeigen, dass die Eckknoten für ein unverzerrtes Element dieser Eigenschaft widersprechen. Konsequenterweise ist das 8- bzw. 6-knotige Randknotenelement in Kombination mit einer herkömmlichen Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation grundsätzlich ungeeignet Kontaktinteraktionen zu beschreiben. Beim Versuch duale Formfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, mit Hilfe der Biorthogonalitätsbedingung (5.409) auf Basis von $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, zu konstruieren, bleiben die an Ξ_a gestellten Rahmenbedingungen verletzt. In [Popp et al., 2012] wurde daraufhin ein neuartiges Konzept präsentiert, welches im Folgenden kurz erläutert werden soll. Als erster Schritt auf dem Weg zur Definition geeigneter quadratischer dualer Ansatzfunktionen für Quad8- und Tri6-Oberflächenfacetten ist es erforderlich, eine Basistransformation der Standardinterpolationsansätze $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, durchzuführen, sodass die modifizierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, das

fundamentale Kriterium

$$\int_{\gamma^{e(1)}} \tilde{N}_a^{(1)} d\gamma^{e(1)} > 0, \quad (5.429)$$

vgl. mit Gl. (5.404)₁, nicht länger verletzen. Basierend auf der in Abschnitt B.1 angegebenen lokalen Knotennummerierung für die behandelten Oberflächenelemente lautet die lokale Basistransformation

$$\{\tilde{N}_1^{(1)}, \dots, \tilde{N}_{n_{\text{en}}^{(1)}}^{(1)}\} = \{N_1^{(1)}, \dots, N_{n_{\text{en}}^{(1)}}^{(1)}\} \mathbf{T}^e, \quad (5.430)$$

mit der konstanten Transformationsmatrix

$$\mathbf{T}^e = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} & \mathbf{0}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} \\ \beta_{\mathbf{T}^e} \left[\mathbf{I}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} + \mathbf{P} \right] & (1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e}) \mathbf{I}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} \end{bmatrix} = [T_{ab}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}, \quad (5.431)$$

$$\mathbf{P} = [p_{ab}] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)}/2 \times n_{\text{en}}^{(1)}/2}, \quad p_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{falls } b = (a \bmod n_{\text{en}}^{(1)}/2) + 1 \\ 0 & \text{andernfalls} \end{cases}$$

für $a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}/2$. Die Funktionsdeklaration des Modulo-Operators \bmod ist Anhang A.2 zu entnehmen. Die angegebene Berechnungsvorschrift (5.430) ist in der Hinsicht symmetrisch, dass Ansatzfunktionen $N_a^{(1)}$ der Kantenknoten $a = n_{\text{en}}^{(1)}/2 + 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, die a priori Gl. (5.404)₁ erfüllen, gleiche Anteile zu ihren benachbarten Eckknoten liefern und so für $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}/2$, die geforderte Eigenschaft (5.429) sicherstellen.¹³¹ Die Skalierung der Kantenknoten $a = n_{\text{en}}^{(1)}/2 + 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ mit dem Faktor $1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e}$ ist unter der Voraussetzung $\beta_{\mathbf{T}^e} < 1/2$ weiterhin mit Gl. (5.429) verträglich. Darüber hinaus erfüllen die modifizierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, wegen der $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, zugeschriebenen charakteristischen Eigenschaft (5.10) sowie der für jede Zeile von \mathbf{T}^e gültigen Identität $\sum_{b=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} T_{ab}^e = 1$ für $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ auch die Konsistenzbedingung $\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} \tilde{N}_a^{(1)} = 1$. In einer detaillierten Analyse zeigen Popp et al. [2012], dass es sinnvoll ist den Parameter $\beta_{\mathbf{T}^e}$ durch den Wert $\beta_{\mathbf{T}^e} = 1/5$ zu fixieren. Die Auswirkungen der Basistransformation auf die klassischen Formfunktionen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, für ein Quad8- bzw. Tri6-Oberflächenelement sind in den Abbildungen C.10 und C.11 im Parameterraum des Slave-Elements $\Omega_{\square}^{(1)}$ visualisiert. Durch Substitution der basistransformierten Formfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, in die Biorthogonalitätsbedingung

$$\int_{\gamma^{e(1)}} \Xi_a \tilde{N}_b^{(1)} d\gamma^{e(1)} = \delta_{ab} \int_{\gamma^{e(1)}} \tilde{N}_b^{(1)} d\gamma^{e(1)} \quad \text{für } a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}, \quad (5.432)$$

¹³¹Gemäß der in Abschnitt B.1 gewählten lokalen Knotennummerierung für die behandelten Quad8- und Tri6-Oberflächenelemente bezeichnet die Auflistung $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}/2$ sämtliche Eckknoten und die Aufzählung $a = n_{\text{en}}^{(1)}/2 + 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ verweist auf die Untermenge der Kantenknoten.

vgl. auch mit Gl. (5.409), und Ausnutzen des in Gestalt der Linearkombination

$$\Xi_a = \sum_{b=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} a_{ab}^e \tilde{N}_b^{(1)} \quad \text{bzw. des in matrizieller Form} \quad \begin{Bmatrix} \Xi_1 \\ \vdots \\ \Xi_{n_{\text{en}}^{(1)}} \end{Bmatrix} = \mathbf{A}^e \begin{Bmatrix} \tilde{N}_1^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{N}_{n_{\text{en}}^{(1)}}^{(1)} \end{Bmatrix} \quad (5.433)$$

gemachten Konstruktionsansatzes resultieren nun zulässige duale Interpolationsansätze für die Lagrange-Multiplikatoren. Die Abbildungen C.12 und C.13 illustrieren für die Quad8- und Tri6-Elementform am Beispiel einer unverzerrten Facettengeometrie die neuen dualen Formfunktionen.

Eine direkte Substitution von Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, in Gl. (5.377), mit dem Ziel die globale Kopplungsmatrix $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ aufzustellen, liefert allerdings ohne Beachtung der den basistransformierten Formfunktionen zugrunde liegenden Struktur eine ineffiziente Kontaktformulierung. Die unterschiedliche Verwendung von slave-seitigen Ansatzfunktionen für den zuvor genannten Berechnungsschritt (5.377) zur Bestimmung von $\hat{\mathbf{D}}$ und der Biorthogonalitätsbedingung (5.432) führt auf den ersten Blick dazu, dass eine Diagonalisierung von $\hat{\mathbf{D}}$ fortfällt und somit eine effiziente statische Kondensationsoperation nicht länger applizierbar ist. Wie Popp et al. [2012] zeigen, kann jedoch durch das Heranziehen alternativer Interpolationsvorschriften für das virtuelle und primäre Verschiebungsfeld auf $\gamma_c^{h(1)}$, welche die modifizierten Formfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, einbeziehen, dieses Defizit beseitigt werden. Für die elementbezogenen Interfacefelder $\mathbf{u}^{h(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}, t)|_{\gamma_c^{h(1)}}$ und $\delta \mathbf{u}^{h(1)}(\mathbf{x}^{h(1)})|_{\gamma_c^{h(1)}}$ gilt fortan:

$$\mathbf{u}^{h(1)}(\mathbf{x}^{h(1)}, t)|_{\gamma_c^{h(1)}} = \mathbf{N}_u^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \mathbf{u}^{e(1)}(t) = \tilde{\mathbf{N}}_u^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \tilde{\mathbf{T}}^{e-1} \mathbf{u}^{e(1)}(t), \quad (5.434)$$

$$\delta \mathbf{u}^{h(1)}(\mathbf{x}^{h(1)})|_{\gamma_c^{h(1)}} = \mathbf{N}_u^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \delta \mathbf{u}^{e(1)} = \tilde{\mathbf{N}}_u^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \tilde{\mathbf{T}}^{e-1} \delta \mathbf{u}^{e(1)}, \quad \text{mit} \quad (5.435)$$

$$\tilde{\mathbf{N}}_u^{e(1)} = [\tilde{\mathbf{N}}_{u1}^{e(1)} \dots \tilde{\mathbf{N}}_{un_{\text{en}}^{(1)}}^{e(1)}] \in \mathbb{R}^{3 \times n_u^{e(1)}}, \quad \tilde{\mathbf{N}}_{ua}^{e(1)} = \tilde{N}_a^{(1)} \mathbf{I}_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}, \quad (5.436)$$

$$\mathbf{T}^{e-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} & \mathbf{0}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} \\ -\frac{\beta_{\mathbf{T}^e}}{1-2\beta_{\mathbf{T}^e}} [\mathbf{I}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} + \mathbf{P}] & \frac{1}{1-2\beta_{\mathbf{T}^e}} \mathbf{I}_{n_{\text{en}}^{(1)}/2} \end{bmatrix} = [\mathbf{T}_{ab}^{e-1}] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}, \quad (5.437)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}^{e-1} = [\tilde{\mathbf{T}}_{ab}^{e-1}] \in \mathbb{R}^{n_u^{e(1)} \times n_u^{e(1)}}, \quad \tilde{\mathbf{T}}_{ab}^{e-1} = \mathbf{T}_{ab}^{e-1} \mathbf{I}_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \quad a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$$

Die extensive Ausnutzung des mit den Einträgen der inversen Transformationsmatrix \mathbf{T}^{e-1} verknüpften Operators $\tilde{\mathbf{T}}^{e-1}$ bei der Interpolation von $\delta \mathbf{u}^{h(1)}(\mathbf{x}^{h(1)})|_{\gamma_c^{h(1)}}$ mündet nach Einsetzen von Gl. (5.435) in die diskrete Form der virtuellen Kontaktarbeit (5.311) und Applikation der Integrations- und Segmentierungsstrategie im \mathbb{R}^3 in dem lokalen slave-seitigen Kopplungsausdruck

$$\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z = \hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z \tilde{\mathbf{T}}^{e-1}, \quad \hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{u}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \Xi_{\lambda}^{eT}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}, \mathbf{u}) \tilde{\mathbf{N}}_u^{e(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g). \quad (5.438)$$

Im Rahmen einer Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation in Kombination mit 6-knotigen quadratischen Dreieck- (Tri6) bzw. 8-knotigen quadratischen Viereck-Interface-Elementen (Quad8) diskretisierten Slave-Oberflächen ersetzt die Beziehung (5.438) den zuvor in Gl. (5.377) angegebenen lokalen Ausdruck. Auf die mit der Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ korrelierenden Beziehungen hat die durchgeführte Basistransformation keinen Einfluss. Weiterhin ist zu beachten, dass die mittels der lokalen Version der Biorthogonalitätsbedingung (5.432) erzeugte Diagonalgestalt von $\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\lambda}^e \times n_{\text{u}}^{e(1)}}$ durch die Multiplikation mit $\tilde{\mathbf{T}}^{e-1} \in \mathbb{R}^{n_{\text{u}}^{e(1)} \times n_{\text{u}}^{e(1)}}$, verloren geht. Werden nun die Beiträge der einzelnen Integrationszellen $\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z \in \mathbb{R}^{n_{\lambda}^e \times n_{\text{u}}^{e(1)}}$ in $\hat{\mathbf{D}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ zusammengeführt, büßt auch die globale quadratische Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}$ ihre algebraisch vorteilhafte Diagonalstruktur ein.¹³² Obwohl die elementbezogene konstante Transformationsmatrix $\tilde{\mathbf{T}}^{e-1}$ zusätzliche Kopplungen im Zusammenhang mit der Assemblierungsprozedur in $\hat{\mathbf{D}}$ induziert, ist es dennoch möglich, aufgrund der einfachen Form der Basistransformation, den Mortar-Operator $\hat{\mathbf{D}}$ auf globaler Ebene rein formal als Produkt

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) = \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \mathbf{T}^{-1} \quad (5.439)$$

darzustellen. Hierbei repräsentiert $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ eine aus den einzelnen Beträgen $\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{u})$ der Integrationszellen zusammengesetzte Diagonalmatrix. Die bereits zum Initialisierungszeitpunkt feststehende Transformationsmatrix

$$\mathbf{T} = [\mathbf{T}_{rs}], \quad \text{mit } \mathbf{T}_{rs} = T_{rs} \mathbf{I}_3, \quad \text{bzw. dessen Inverse } \mathbf{T}^{-1} = [\mathbf{T}_{rs}^{-1}], \quad \text{mit } \mathbf{T}_{rs}^{-1} = T_{rs}^{-1} \mathbf{I}_3,$$

ergeben sich aus den bereits angegebenen lokalen Gegenstücken $\mathbf{T}^e = [T_{ab}^e]$ und $\mathbf{T}^{e-1} = [T_{ab}^{e-1}]$. Im Rahmen einer technischen Umsetzung für $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ bzw. $\mathbf{T}^{-1} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ ist lediglich die lokale Knotennummerierung $a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ durch die entsprechende globale Indexierung $r, s \in \mathcal{S}$ zu ersetzen. Wie Abschnitt 5.7 noch in aller Ausführlichkeit erörtert, setzt die Durchführung der statischen Kondensation für die diskreten Lagrange-Multiplikatoren die Invertierung von $\hat{\mathbf{D}}$ voraus. Angesichts der formal aufgestellten multiplikativen Verknüpfung (5.439) folgt die inverse Mortar-Matrix unmittelbar aus $\hat{\mathbf{D}}^{-1} = \mathbf{T} \hat{\mathbf{D}}^{-1}$. Da die globalen Transformationsmatrizen \mathbf{T} und \mathbf{T}^{-1} a priori determinierbar sind und die triviale Inversion der Diagonalmatrix $\hat{\mathbf{D}}$ keine Schwierigkeiten bereitet, gelingt es ohne signifikanten Mehraufwand die vorteilhafte Eigenschaft einer Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation, nämlich die Möglichkeit zur statischen Kondensation der dualen Variablen, auch für die besprochenen quadratischen Interfacediskretisierungen (Tri6, Quad8) zu bewahren. Algorithmisch ist dieser Sachverhalt ebenfalls

¹³²Die Multiplikation von $\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z$ mit $\tilde{\mathbf{T}}^{e-1}$, siehe Gl. (5.438)₁, resultiert in Nebendiagonaleinträgen $\hat{D}_{ab}^s \neq 0$ für $a = n_{\text{en}}^{(1)}/2 + 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, $b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}/2$. Daraufhin manifestieren sich durch die Assemblierung von $\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z$ in $\hat{\mathbf{D}}$ auch zusätzliche Nebendiagonaleinträge \hat{D}_{rs} , $r \neq s$, $r \in \mathcal{S}$, $s \in \mathcal{S}$. Die hinzukommenden Kopplungen in $\hat{\mathbf{D}}$ beschränken sich allerdings auf Abhängigkeiten in der lokalen Umgebung eines Slave-Knotens $s \in \mathcal{S}$. Präziser formuliert, es werden sämtliche Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$, die sich auf den Ecken der Facetten von $\gamma_c^{h(1)}$ befinden, mit den Kantenknoten direkt an $s \in \mathcal{S}$ angrenzender Facetten gekoppelt. Abgesehen von $r = s$ beschränkt sich die Auswahl des Index r , $r \in \mathcal{S}$, für welchen $\hat{D}_{rs} \neq 0$ vorliegt, deshalb auf diese in der Nähe von $s \in \mathcal{S}$ lokalisierte Untermenge.

an der schwachbesetzten Matrixstruktur von $\hat{\mathbf{D}}^{-1}$ bzw. $\hat{\mathbf{D}}$ nachvollziehbar. Obwohl nicht im Detail in der vorliegenden Arbeit erläutert, sei angemerkt, dass die statischen Kondensationsoperationen, siehe Abschnitt 5.7, unter Beachtung der durch die Eckknoten der Elemente von $\gamma_c^{h(1)}$ induzierten zusätzlichen Abhängigkeiten von den Kantenknoten direkt angrenzender Facetten vollständig auf lokaler Ebene umgesetzt werden können. Eine globale Realsierung auf Basis von Gl. (5.439) ist aufgrund des hohen numerischen Ressourceneinsatzes nicht zu empfehlen.

5.5.5 Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie

Die Behandlung der semidiskreten Gleichungsstruktur aus Tab. 5.9 für ein unilaterales Kontaktproblem offenbart eine grundlegende Schwierigkeit. Diese besteht darin, dass die zu erfüllenden, punktweise definierten Nebenbedingungen (5.328) und (5.337) in Form von Ungleichungen auftreten. Vorerst nur bezugnehmend auf die diskreten, normalen Kontaktbedingungen (5.328) unterteilt die hierdurch zusätzlich eingebrachte Nichtlinearität den vollständigen Satz an Slave-Knoten \mathcal{S} in zwei a priori unbekannte Mengen von aktiven und inaktiven Kontaktknoten, \mathcal{A} und \mathcal{I} . Es gilt:

$$\mathcal{S} = \mathcal{A} \cup \mathcal{I}, \quad \mathcal{A} \cap \mathcal{I} = \emptyset \quad (5.440)$$

Zum Auflösen dieser Kontaktnichtlinearität wird eine sogenannte Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie (PDASS) bzw. in Kurzform Aktive-Mengen-Strategie angewendet.¹³³ Der Grundgedanke jeder Primal-Dualen Aktiven-Mengen-Strategie im Rahmen der numerischen Kontaktmechanik ist, aus der Menge aller Slave-Knoten \mathcal{S} die Untermenge der aktiv an den Kontaktinteraktionen beteiligten Knoten $\mathcal{A} \subset \mathcal{S}$ und das Kontingent von inaktiven Slave-Knoten $\mathcal{I} = \mathcal{S} \setminus \mathcal{A}$ auf dem Interfacerand $\gamma_c^{h(1)}$ zu ermitteln. Darüber hinaus werden in einer auf die jeweilige Aktive-Mengen-Strategie abgestimmten Art und Weise durch die spezifische Aufteilung in \mathcal{A} und \mathcal{I} die Ungleichheitsbedingungen (5.328) und (5.337) in Gleichheitsrestriktionen überführt. Für eine mathematisch fundierte Beschreibung zur PDASS sei exemplarisch auf [Alart und Curnier, 1991; Christensen et al., 1998; Hintermüller et al., 2003; Hübner und Wohlmuth, 2005] referiert.

Wie u. a. Popp [2012] zeigt, nimmt für ein reibungsfreies Kontaktproblem ein erster naiver Ansatz die Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{g}_r &= 0 \quad \forall r \in \mathcal{A}, \\ \lambda_{Nr} &= 0 \quad \forall r \in \mathcal{I}, \\ \tilde{g}_r \lambda_{Nr} &= 0 \quad \forall r \in \mathcal{S} \end{aligned} \quad (5.441)$$

an. Hierbei werden gemäß der intentionalen Aussage der normalen Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen die geometrischen Randbedingungen (5.441)₁ (Inpenetrabilitätsbedingung) an allen aktiven Slave-Knoten $r \in \mathcal{A}$ und die durch den normalen Anteil des Lagrange-Multiplikators imitierten Spannungsrandbedingungen (5.441)₂ an allen inaktiven Slave-Knoten $r \in \mathcal{I}$ vorgeschrieben. Durch Vorgabe von \mathcal{A} und \mathcal{I} liefert die Komplementaritätsgleichung (5.441)₃ keine weiteren relevanten Informationen. Mit Blick auf die vollständige

¹³³Das Ermittlungskonzept wird als Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie bezeichnet, da in die Bestimmung der Untermengen \mathcal{A} und \mathcal{I} sowohl primale (Verschiebungen) als auch duale Variablen (Lagrange-Multiplikatoren) eingehen.

nichtlineare Lösungsprozedur führt eine numerische Umsetzung auf zwei ineinander geschachtelte Iterationsschleifen innerhalb eines Zeitschritts, wobei die äußere Schleife Fixpunktiterationen $l = 1, 2, \dots$ zur Aktualisierung des korrekten aktiven Satzes $\mathcal{A}^{(l)}$ durchläuft, während bei fixierten $\mathcal{A}^{(l)}$ und $\mathcal{I}^{(l)}$ in der inneren Schleife durch das globale Newton-Raphson-Verfahren ein nichtlineares Gleichungssystem,¹³⁴ bestehend aus den zeitdiskretisierten Strukturgleichungen, siehe Abschnitt 5.6, und den ergänzten Gleichheitsnebenbedingungen (5.441)₁ und (5.441)₂, gelöst wird. Da es sich zumeist bei der initial vorgegebenen Aufteilung $\mathcal{A}^{(1)}$ und $\mathcal{I}^{(1)}$, mit $\mathcal{S} = \mathcal{A}^{(1)} \cup \mathcal{I}^{(1)}$ und $\mathcal{A}^{(1)} \cap \mathcal{I}^{(1)} = \emptyset$, noch nicht um auskonvergierte Teilmengen handelt, müssen die zu Beginn der Aktiven-Mengen-Iterationsschleife deklarierten Sätze sukzessive verbessert werden. Leider stellt der in Gl. (5.441) aufgeführte Gleichungssatz keine direkte Möglichkeit zum Auffinden der korrekten, aktiven Menge \mathcal{A} zur Verfügung. Daher hat es sich als zweckmäßig erwiesen, die folgenden Bestimmungsgleichungen

$$\mathcal{A}^{(l+1)} = \{r \in \mathcal{S} \mid (\lambda_{Nr} - \kappa_N \tilde{g}_r) > 0\}, \quad \mathcal{I}^{(l+1)} = \{r \in \mathcal{S} \mid (\lambda_{Nr} - \kappa_N \tilde{g}_r) \leq 0\}, \quad (5.442)$$

mit dem algorithmischen Parameter $\kappa_N > 0$, an das Ende der äußeren Fixpunktiterationsschleife anzufügen. Falls sich dabei ein Unterschied zu den bisherigen Mengen $\mathcal{A}^{(l)}$ und $\mathcal{I}^{(l)}$ ergibt, ist ein erneuter Durchlauf der geschachtelten Lösungsprozedur mit den aktualisierten Sätzen $\mathcal{A}^{(l+1)}$ und $\mathcal{I}^{(l+1)}$ erforderlich. Im Allgemeinen zeichnet sich die geschachtelte Vorgehensweise durch ein sehr stabiles Konvergenzverhalten aus. Weitere Details zu dieser auf einem Fixpunktverfahren basierenden PDASS im Rahmen einer mortar-basierten Kontaktformulierung für große Deformationen sind [Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann und Ramm, 2008; Hesch und Betsch, 2009] zu entnehmen.

Der zuvor auf Basis einer geschachtelten Lösungsprozedur vorgestellte Ansatz impliziert einen hohen Rechenaufwand, sodass dieser in der vorliegenden Arbeit nicht weiter verfolgt wird. Im restlichen Teil dieses Abschnitts soll ein algorithmisch effizienterer Ansatz für eine Aktive-Mengen-Strategie erörtert werden. Vorgreifend auf Abschnitt 5.7, in dem die iterative Lösungsstrategie spezifiziert wird, gelingt es mit diesem alternativen Konzept in einem gemeinsamen Newton-Raphson-Verfahren alle Nichtlinearitäten, resultierend aus der Geometrie, dem Material und der Kontaktinteraktion, aufzulösen. Mathematisch motiviert wird diese Strategie durch die Definition von sogenannten Komplementaritätsfunktionen,¹³⁵ siehe Abschnitte 5.5.5.1 und 5.5.5.2, welche die semidiskreten KKT-Bedingungen (5.328) und (5.337) ersetzen. Wie Popp et al. [2009], Popp et al. [2010], Popp et al. [2012], Popp [2012] und Gitterle [2012] unter Verweis auf [Qi und Sun, 1993; Christensen et al., 1998; Hintermüller et al., 2003] darlegen, ist der resultierende Primal-Duale Aktive-Mengen-Ansatz äquivalent zu einer Applikation eines globalen semiglatten Newton-Verfahrens¹³⁶ auf die zeitdiskretisierten Gleichungen. Für konkrete Anwendungen dieser ursprünglich aus der Optimierungstheorie mit Ungleichheitsbedingungen stammenden PDASS im Bereich der numerischen Kontaktmechanik sei

¹³⁴In der einschlägigen Fachliteratur ist auch von einer sogenannten exakten Aktiven-Mengen-Strategie die Rede, da innerhalb jeder Fixpunktiteration das resultierende nichtlineare Gleichungssystem exakt gelöst wird.

¹³⁵Das Konzept der Komplementaritätsfunktionen ist auch auf andere Bereiche der Festkörpermechanik, wie z. B. der Plastizität, anwendbar.

¹³⁶In der englischsprachigen Literatur wird das Verfahren als „semi-smooth Newton method“ bezeichnet.

auf [Christensen et al., 1998; Hübner und Wohlmuth, 2005; Hübner et al., 2008; Wohlmuth, 2011; Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Gitterle et al., 2010; Cichosz und Bischoff, 2011; Hesch und Betsch, 2011c; Popp et al., 2012] referiert.

5.5.5.1 Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie für Normalkontakt

Wie detailliert in [Popp, 2012] und der dort zitierten Literatur dargestellt, lautet für jeden Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ die nichtlineare Komplementaritätsfunktion in normaler Richtung

$$c_{Nr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r) = \lambda_{Nr} - \max(0, \lambda_{Nr} - \kappa_N \tilde{g}_r), \quad \kappa_N > 0. \quad (5.443)$$

Die Funktion (5.443) hängt nichtlinear von den diskreten Knotenverschiebungen $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ ab, da sowohl der knotenspezifische Normalenvektor \mathbf{n}_r zur Generierung von λ_{Nr} , siehe Gl. (5.304), als auch die gewichtete Normalklaffung $\tilde{g}_r(\mathbf{u})$ mit der Deformation gekoppelt sind. In einer einfachen Handrechnung kann gezeigt werden, dass für beliebige positive Werte des algorithmischen Parameters κ_N , $\kappa_N > 0$, die diskreten Zwangsbedingungen (5.328) äquivalent zu der mit Hilfe der knotenspezifischen Komplementaritätsfunktion (5.443) nachfolgend angegebenen skalaren Gleichheitsrestriktion sind:

$$c_{Nr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r) = 0, \quad \kappa_N > 0 \quad (5.444)$$

Infolge dieser Identität, welche in Bezug auf Gl. (5.444) auf das Verhalten der halbglatte max-Funktion¹³⁷

$$\max : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto y = \max(s, x) := \begin{cases} x & \text{für } x > s \\ s & \text{für } x \leq s \end{cases}, \quad s \in \mathbb{R}, \quad (5.445)$$

und deren Aufteilung in zwei Lösungsbereiche zurückzuführen ist, erlaubt die Äquivalenzaussage (5.444) ohne die Einführung zusätzlicher Approximationen eine Fallunterscheidung in das aktive Knotenset \mathcal{A} und das inaktive Kontingent \mathcal{I} . Abb. 5.26a verdeutlicht den geschilderten Sachverhalt schematisch. Die Präzisierung in Form von Bestimmungsgleichungen für \mathcal{A} und \mathcal{I} erfolgt allerdings erst in Abschnitt 5.7. Außerdem ist hervorzuheben, dass κ_N einen rein algorithmischen Parameter repräsentiert, der im Gegensatz zu einem Penalty-Parameter keinen Einfluss auf die Ergebnisse hat. Die die PDASS charakterisierende Kennzahl $\kappa_N > 0$ wirkt sich lediglich auf den Konvergenzverlauf des globalen halbglatte Newton-Verfahrens aus. Um den Unterschied in der Differenz zwischen den Normalkomponenten λ_{Nr} und \tilde{g}_r in Gl. (5.443) auszugleichen und optimale Konvergenzeigenschaften zu erhalten, wird κ_N in der Größenordnung der zugrunde liegenden Struktursteifigkeit gewählt. Hübner und Wohlmuth [2005] schlagen vor im Fall von linear-elastischen Materialverhalten einen positiven Wert $\kappa_N > 0$ in der Größenordnung des Elastizitätsmoduls zu verwenden. Anhand numerischer Beispiele relativieren Popp et al. [2009] und Popp et al. [2010] diese Aussage und stellen nur einen geringen Einfluss

¹³⁷Bei der max-Funktion handelt es sich um eine kontinuierliche, nicht glatte Funktion, deren Ableitung im klassischen Sinne an der Stelle $x = s$ nicht eindeutig definiert ist. Erst durch die Anwendung verallgemeinerter Ableitungskonzepte ist es möglich, eine adäquate Linearisierung des max-Operators in Gestalt einer modifizierten Sprungfunktion, siehe Gl. (5.519), anzugeben.

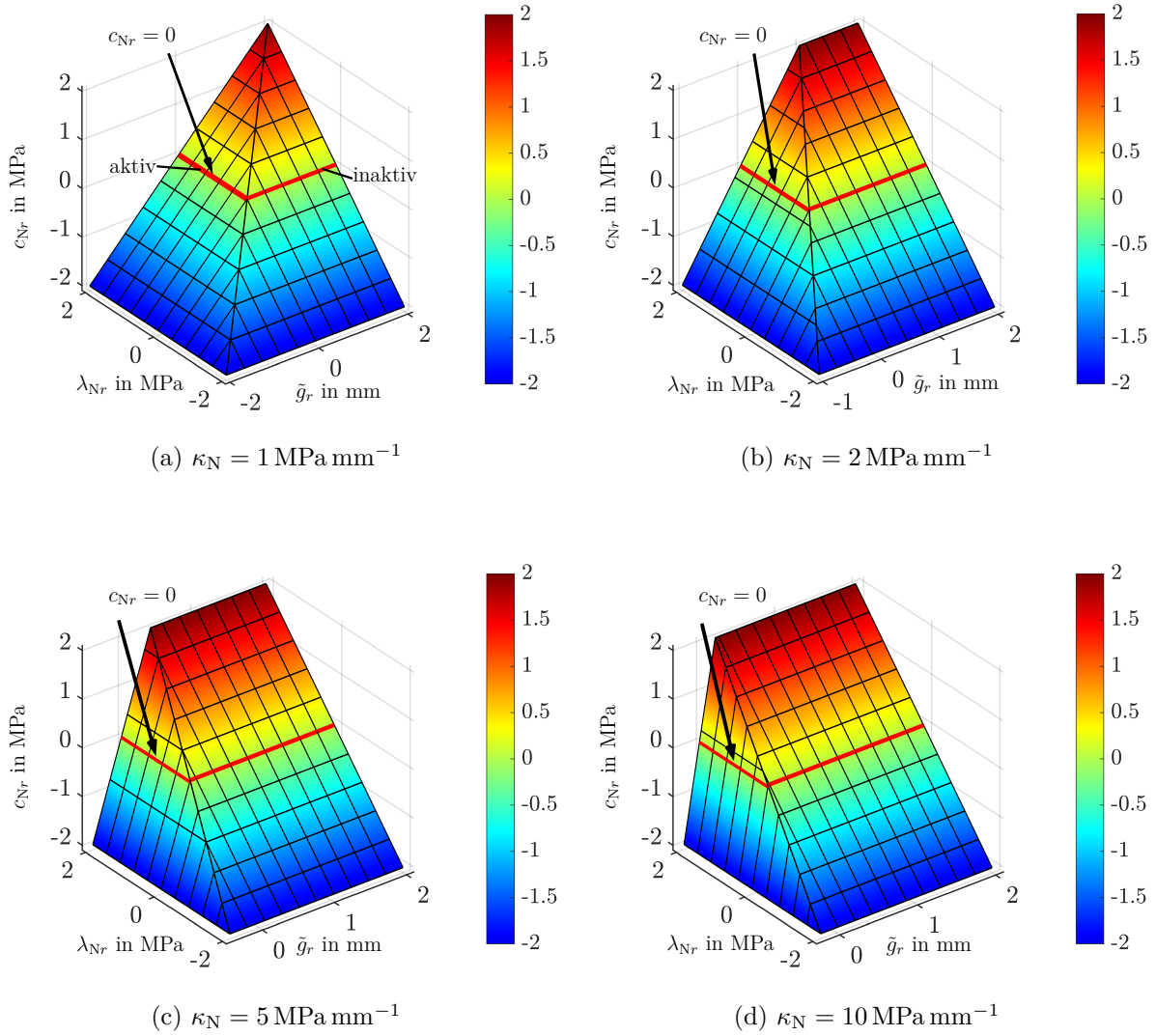


Abbildung 5.26: Parameterstudie in Abhängigkeit von κ_N für die nichtlineare Komplementaritätsfunktion $c_{Nr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r)$ in normaler Richtung

von κ_N innerhalb eines breiten Wertespektrums auf die Konvergenzeigenschaften fest. Die Abb. 5.26 zeigt anhand einer in Abhängigkeit von κ_N durchgeführten Parameterstudie den Einfluss von κ_N auf die in $r \in \mathcal{S}$ ausgewertete nichtlineare Komplementaritätsfunktion c_{Nr} .

Nach Popp [2012] kann die Verwendung der Definition (5.443) auch als das Einbringen einer Regularisierung für die unstetige Entscheidung, ob der Slave-Knoten aktiv oder inaktiv ist, interpretiert werden. Aus diesem Grund enthält die erläuterte PDASS alle notwendigen Ableitungsinformationen zur Aktualisierung der Mengen \mathcal{A} und \mathcal{I} innerhalb eines hierzu äquivalenten semiglatten Newton-Verfahrens, siehe Abschnitt 5.7. Neben den Geometrie- und Materialnichtlinearitäten können so in einer einzigen gemeinsamen Gleichgewichtsiterationsschleife auch die mit dem Kontakt gepaarten Nichtlinearitätsressourcen aufgelöst werden.

5.5.5.2 Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie für Tangentialkontakt

Reibungsbehafteter Tangentialkontakt Die Umformulierung der semidiskreten, reibungsbehafteten Ungleichheitsbedingungen (5.337) erfordert neben dem zuvor eingeführten Aktiven-Mengen-Ansatz in normaler Richtung eine zusätzliche Fallunterscheidung des aktiven Slave-Knotensatzes \mathcal{A} und damit die Verfolgung einer erweiterten PDASS. In Übereinstimmung mit den beiden Lösungszweigen des Coulombschen Reibgesetzes wird \mathcal{A} in zwei weitere Untermengen \mathcal{G} und \mathcal{H} unterteilt, wobei $\mathcal{G} \subset \mathcal{A}$ den Ausschnitt der aktuell gleitenden Slave-Knoten auf $\gamma_c^{h(1)}$ und $\mathcal{H} = \mathcal{A} \setminus \mathcal{G}$ das Kontingent von haftenden Slave-Knoten umfasst. In Analogie zum vorherigen Abschnitt 5.5.5.1 kann mittels einer von Hübner et al. [2008] und Hübner [2008] vorgeschlagenen nichtlinearen Komplementaritätsfunktion

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}_r) &= \begin{Bmatrix} c_{\xi r} \\ c_{\eta r} \end{Bmatrix} = \max(\mu_c(\lambda_{Nr} - \kappa_N \tilde{g}_r), \|\boldsymbol{\lambda}_{Tr} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}\|) \boldsymbol{\lambda}_{Tr} \\ &\quad - \mu_c \max(0, \lambda_{Nr} - \kappa_N \tilde{g}_r) \{\boldsymbol{\lambda}_{Tr} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}\} \in \mathbb{R}^2, \quad \kappa_N > 0, \quad \kappa_\tau > 0, \end{aligned} \quad (5.446)$$

das semidiskrete Coulombsche Reibgesetz (5.337) am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ gleichwertig durch

$$\mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}_r) = \begin{Bmatrix} c_{\xi r} \\ c_{\eta r} \end{Bmatrix} = \mathbf{0}, \quad \kappa_N > 0, \quad \kappa_\tau > 0, \quad (5.447)$$

ausgedrückt werden,¹³⁸ siehe auch [Gitterle et al., 2010; Wohlmuth, 2011; Gitterle, 2012]. Zur Beschreibung der reibungsbehafteten Effekte in der im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ errichteten Tangentialebene werden, wie schon für Gl. (5.337), die Komponentenvektoren $\boldsymbol{\lambda}_{Tr} = \{\lambda_{\xi r}, \lambda_{\eta r}\}^T \in \mathbb{R}^2$ und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} = \{\tilde{v}_{\xi r}, \tilde{v}_{\eta r}\}^T \in \mathbb{R}^2$ herangezogen. Abb. 5.27 veranschaulicht für den zweidimensionalen Fall die postulierte Äquivalenzaussage. Wie die Konstante κ_N zuvor, repräsentiert die Größe κ_τ einen rein algorithmischen Parameter, der lediglich den Konvergenzverlauf des halbglaten Newton-Verfahrens beeinflusst. Obwohl

¹³⁸Die bezogen auf die Tangentialbasis eines Slave-Knotens $r \in \mathcal{S}$ formulierte Aussage (5.447) entspricht im dreidimensionalen Fall einer Gleichung mit zwei Komponenten. Im \mathbb{R}^2 reduziert sich Gl. (5.447) infolge $\boldsymbol{\tau}_r = [\tau_{\xi r}]$, $\boldsymbol{\lambda}_{Tr} = \{\lambda_{\xi r}\}$ und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} = \{\tilde{v}_{\xi r}\}$ auf eine skalare Beziehung.

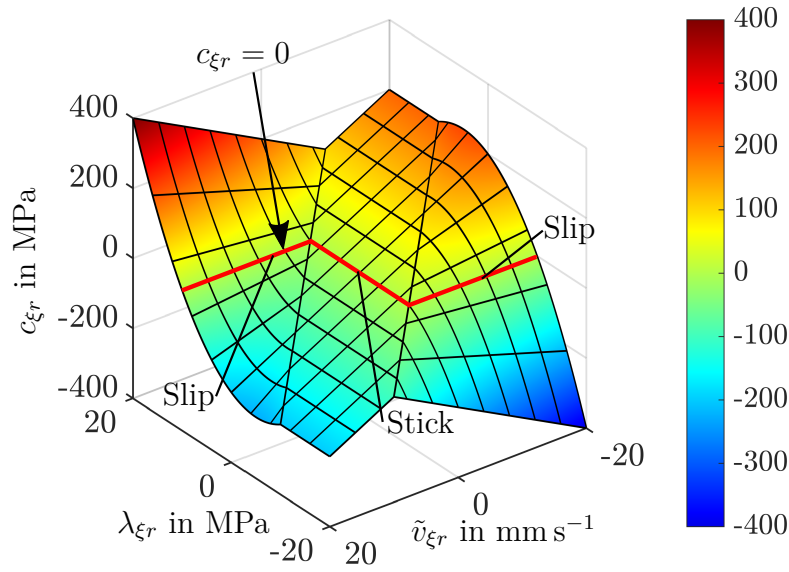


Abbildung 5.27: Darstellung der knotenspezifischen, tangentialen Komplementaritätsfunktion $\mathbf{c}_{Tr} = \{c_{\xi r}\}$ in 2D, mit $\boldsymbol{\lambda}_{Tr} = \{\lambda_{\xi r}\}$ und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} = \{\tilde{v}_{\xi r}\}$ sowie der fixierten Wahl: $\mu_c = 1$, $\kappa_\tau = 1 \text{ MPa s mm}^{-1}$ und $\lambda_{Nr} - \kappa_N \tilde{g}_r = 10 \text{ MPa}$ (aktiver Slave-Knoten)

die Definition (5.446) nicht die einzige Möglichkeit für die Formulierung einer schlupf-behafteten Komplementaritätsbeziehung für das Reibgesetz nach Coulomb darstellt, siehe [Christensen et al., 1998; Alart und Curnier, 1991; Hübner, 2008], ist sie hinsichtlich Robustheitsaspekten die erste Wahl. Weitere Details hierzu sind [Gitterle et al., 2010; Gitterle, 2012] zu entnehmen.

Die Fallunterscheidung in die Knotensätze \mathcal{G} und \mathcal{H} ist kongruent zu Abschnitt 5.5.5.1 inhärent in der nichtlinearen Komplementaritätsfunktion (5.446) enthalten und wiederholt auf die Eigenschaften der nicht glatten max-Funktion, siehe Gl. (5.445), zurückzuführen. Die erweiterte PDASS zur Behandlung von reibungsbehafteten Kontakt kombiniert damit die Gleichungen (5.444) und (5.447), sodass aus den hierin enthaltenen Ableitungsinformationen die Teilbereiche $\mathcal{G} \subset \mathcal{A}$, $\mathcal{H} \subset \mathcal{A}$ und $\mathcal{I} = \mathcal{S} \setminus \mathcal{A}$ aus $\mathcal{S} = \mathcal{A} \cup \mathcal{I} = \mathcal{G} \cup \mathcal{H} \cup \mathcal{I}$ extrahiert sowie \mathcal{G} , \mathcal{H} und \mathcal{I} im Rahmen des globalen semiglatten Newton-Verfahrens aktualisiert werden können, siehe Abschnitt 5.7. Neben den Geometrie- und Materialnichtlinearitäten können so in einer einzigen gemeinsamen Gleichgewichtsiterationsschleife die mit dem Normal- und Tangentialkontakt einhergehenden Nichtlinearitäten abgehandelt werden.

Reibungsloser Tangentialkontakt Für ein Kontaktszenario ohne Reibung ist die in Abschnitt 5.5.5.1 vorgestellte Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie ausreichend, da die zugehörigen diskreten Kontaktkontakbedingungen (5.338) bereits als Gleichheitsnebenbedingungen vorliegen. Um eine in Anlehnung an die Gl. (5.446) und (5.447) einheitliche Nomenklatur zu erzeugen, wird die semidiskrete reibungsfreie Zwangsbedingung (5.338)

als

$$\mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r) = \begin{Bmatrix} c_{\xi r} \\ c_{\eta r} \end{Bmatrix} = \mathbf{0}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r) = \begin{Bmatrix} c_{\xi r} \\ c_{\eta r} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\lambda}_{Tr} = \begin{Bmatrix} \lambda_{\xi r} \\ \lambda_{\eta r} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\tau}_r^T \boldsymbol{\lambda}_r, \quad (5.448)$$

umgeschrieben.

5.5.6 Zusammenfassung der semidiskreten Strukturgleichungen

Bevor in den folgenden Abschnitten auf die Zeitdiskretisierung sowie die konsistente Linearisierung der ein unilaterales Kontaktproblem charakterisierenden effektiven Strukturgleichungen eingegangen wird, sei die zu lösende semidiskrete Gleichungsstruktur noch einmal kompakt zusammengefasst:

$$\begin{aligned} M\ddot{\mathbf{u}}(t) &= -\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) + \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) - \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) - \overline{M}\ddot{\mathbf{u}}(t), \\ \dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t), \\ \mathbf{c}_N(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{c}_T(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}) &= \mathbf{0} \quad \text{oder} \quad \mathbf{c}_T(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.449)$$

Die Anwendung der in Abschnitt 5.5.5 beschriebenen PDASS liefert äquivalente gleichheitsrestringierte Kontaktbedingungen. Im Sinne einer ganzheitlichen globalen Betrachtung werden die an jedem Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ definierten Komplementaritätsfunktionen, siehe Gl. (5.443) und (5.446), in den globalen Spaltenvektoren

$$\mathbf{c}_N(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \bigvee_{r \in \mathcal{S}} \mathbf{c}_{Nr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r) \in \mathbb{R}^{n_S^n}, \quad (5.450)$$

$$\mathbf{c}_T(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}) = \bigvee_{r \in \mathcal{S}} \mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}_r) \in \mathbb{R}^{(n_{\text{uus}} - n_S^n)} \quad (5.451)$$

zusammengeführt. Für den reibungsfreien Fall ersetzt

$$\mathbf{c}_T(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \bigvee_{r \in \mathcal{S}} \mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r) \in \mathbb{R}^{(n_{\text{uus}} - n_S^n)}, \quad (5.452)$$

mit den ratenunabhängigen, tangentialen Kontaktbedingungen (5.448), die Assemblierungsvorschrift (5.451). Im nächsten Schritt wird das weiterhin in der Zeit kontinuierliche DAE-System im Rahmen der vertikalen Linienmethode der Zeitdiskretisierung, siehe auch Abschnitt 5.2, unterzogen.

5.6 Zeitdiskretisierung der Mortar-Kontaktformulierung

Der folgende Abschnitt befasst sich mit der zeitlichen Diskretisierung der semidiskreten Strukturgleichungen (5.449) mit Hilfe der in Abschnitt 5.2 vorgestellten diagonalimpliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) oder der Generalized- α Methode (Gen- α). Hierbei sind prinzipiell sämtliche Parametrisierungskonzepte in der Zeit aus Abschnitt 5.2 auf das zeitkontinuierliche DAE-System (5.449) übertragbar, sodass der Fokus des vorliegenden Abschnitts auf einer Beschreibung der Zeitdiskretisierung für die mit der mortar-basierten Kontaktformulierung assoziierten Raumdiskretisierungsgrößen liegt.

Zeitdiskretisierung der Mortar-Integrale $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ Bei den globalen Mortar-Integralen $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$, also den Komponenten der Kopplungsmatrizen

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}},$$

handelt es um algebraische Größen, die lediglich vom aktuellen Deformationszustand abhängen. Aus diesem Grund stellt deren Zeitdiskretisierung keine Schwierigkeit dar. Unter Verwendung der in den Abschnitten 5.2.1 bis 5.2.3 geprägten Nomenklatur für die DIRK-Verfahren ergibt sich

$$\hat{D}_{rs}|_{ni} := \hat{D}_{rs}(\mathbf{u}_{ni}), \quad \hat{\mathbf{D}}_{rs}|_{ni} := \hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u}_{ni}), \quad r \in \mathcal{S}, \quad s \in \mathcal{S}, \quad \hat{\mathbf{D}}|_{ni} := \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}_{ni}), \quad (5.453)$$

$$\hat{M}_{rt}|_{ni} := \hat{M}_{rt}(\mathbf{u}_{ni}), \quad \hat{\mathbf{M}}_{rt}|_{ni} := \hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u}_{ni}), \quad r \in \mathcal{S}, \quad t \in \mathcal{M}, \quad \hat{\mathbf{M}}|_{ni} := \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}_{ni}), \quad (5.454)$$

mit dem Stufenwert $\mathbf{u}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$. Im Kontext zur Generalized- α Methode, siehe Abschnitt 5.2.4, wird in der vorliegenden Arbeit exklusiv eine Interpolationsregel vom Mittelpunktstyp, die die raumdiskretisierten Mortar-Operatoren zum Zeitpunkt $T_{n+\alpha_f} = \alpha_f t_{n+1} + (1 - \alpha_f)t_n$ bzw. mit den $T_{n+\alpha_f}$ assoziierten Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_{n+\alpha_f} = \alpha_f \mathbf{u}_{n+1} + (1 - \alpha_f)\mathbf{u}_n \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ ausgewertet, verwendet. Dies mündet in den folgenden Beziehungen

$$\hat{D}_{rs}|_{n+\alpha_f} := \hat{D}_{rs}(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}), \quad \hat{\mathbf{D}}_{rs}|_{n+\alpha_f} := \hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}), \quad \hat{\mathbf{D}}|_{n+\alpha_f} := \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}), \quad (5.455)$$

$$\hat{M}_{rt}|_{n+\alpha_f} := \hat{M}_{rt}(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}), \quad \hat{\mathbf{M}}_{rt}|_{n+\alpha_f} := \hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}), \quad \hat{\mathbf{M}}|_{n+\alpha_f} := \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}), \quad (5.456)$$

mit $r, s \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{M}$. Eine andere adäquate Alternative stellt die Interpolation mit Hilfe einer verallgemeinerten Trapezregel dar. Exemplarisch anhand des Mortar-Integrals \hat{D}_{rs} veranschaulicht, resultiert dies in einem Ausdruck der Gestalt

$$\begin{aligned} \hat{D}_{rs}|_{n+\alpha_f} &:= \alpha_f \hat{D}_{rs}|_{n+1} + (1 - \alpha_f) \hat{D}_{rs}|_n, \\ \hat{D}_{rs}|_n &:= \hat{D}_{rs}(\mathbf{u}_n), \quad \hat{D}_{rs}|_{n+1} := \hat{D}_{rs}(\mathbf{u}_{n+1}). \end{aligned} \quad (5.457)$$

Infolge der geometrischen Nichtlinearität sind die Beziehungen (5.455)₁ und (5.457) nicht äquivalent. Um den Modifikations- und Steuerungsaufwand zwischen beiden Zeitintegrationsverfahren in einem selbst entwickelten Finite-Elemente-Programm so gering wie möglich zu halten, wird allerdings von letzterer Interpolationsregel Abstand genommen. Es soll jedoch nicht unerwähnt bleiben, dass eine einfache Berechnungsvorschrift vom Mittelpunktstyp, die lediglich auf Auswertungen zum Zeitpunkt $T_{n+\alpha_f}$ zurückgreift, die algebraischen Nichtdurchdringungsbedingungen (5.450) auch nur für $T_{n+\alpha_f}$ erfüllen kann. Weitere Details hierzu sind Popp [2012] zu entnehmen.

Zeitdiskretisierung der semidiskreten Kontaktkraft $\mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})$ Prinzipiell können die Aussagen des vorhergehenden Paragraphen für die Zeitdiskretisierung des semidiskreten Kontaktkraftvektors $\mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ unverändert übernommen werden. Aus der linearen Abbildung (5.320) folgt für die Verfahrensvorschrift der DIRK-Verfahren der Ausdruck

$$\mathbf{f}_c|_{ni} := \mathbf{f}_c(\mathbf{u}_{ni}, \boldsymbol{\Lambda}_{ni}) = \hat{\mathbf{B}}^\top|_{ni} \boldsymbol{\Lambda}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}, \quad (5.458)$$

wobei

$$\hat{\mathbf{B}}|_{ni} := \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{U}_{ni}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{uuS} \times n_{uuN}} & \hat{\mathbf{D}}|_{ni} & -\hat{\mathbf{M}}|_{ni} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uu}} \quad (5.459)$$

den deformationsabhängigen Interface-Operator der i -ten Stufe und $\mathbf{\Lambda}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ den aktuellen zu bestimmenden Stufenwert der diskreten Lagrange-Multiplikatoren wiedergeben. Unter Austausch des Zeitintegrationsverfahrens resultieren deckungsgleiche Ausdrücke für die Generalized- α Methode. Es gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_c|_{n+\alpha_f} &:= \mathbf{f}_c(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}) = \hat{\mathbf{B}}^T|_{n+\alpha_f} \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}, \quad \text{mit} \\ \hat{\mathbf{B}}|_{n+\alpha_f} &:= \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{uuS} \times n_{uuN}} & \hat{\mathbf{D}}|_{n+\alpha_f} & -\hat{\mathbf{M}}|_{n+\alpha_f} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.460)$$

Die Interpolation des im Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ ausgewerteten dualen Variablenvektors $\mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ geschieht analog zu den Gleichungen (5.143)₁ und (5.143)₂ gemäß

$$\mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f} = \alpha_f \mathbf{\lambda}_{n+1} + (1 - \alpha_f) \mathbf{\lambda}_n. \quad (5.461)$$

Zeitdiskretisierung der gewichteten Normalklaffung $\tilde{g}_r(\mathbf{u})$ Das aus der angewendeten Mortar-Methode hervorgehende knotenweise definierte, fundamentale Kinematikmaß \tilde{g}_r , $r \in \mathcal{S}$, entspricht infolge der Definition (5.324), ebenso wie die beiden Mortar-Integrale $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$, einer rein algebraischen Größe. Die Umsetzung der Verfahrensvorschrift für einen DIRK-Integrator impliziert daher die folgende zeitdiskretisierte Abstandsfunktion

$$\begin{aligned} \tilde{g}_r|_{ni} &:= \tilde{g}_r(\mathbf{U}_{ni}) = -\mathbf{n}_r^T|_{ni} \tilde{\mathbf{g}}_r|_{ni}, \quad \text{mit dem gewichteten Klaffungsvektor} \\ \tilde{\mathbf{g}}_r|_{ni} &:= \tilde{\mathbf{g}}_r(\mathbf{U}_{ni}) = \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs}|_{ni} \mathbf{x}_s^{(1)}|_{ni} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt}|_{ni} \mathbf{x}_t^{(2)}|_{ni}, \quad r \in \mathcal{S}, \end{aligned} \quad (5.462)$$

in Abhängigkeit der den Deformationszustand zum Zeitpunkt T_{ni} charakterisierenden Knotenverschiebungen $\mathbf{U}_{ni}^T = \{\mathbf{U}_1^T|_{ni}, \dots, \mathbf{U}_n^T|_{ni}\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, $\mathbf{U}_j|_{ni} \in \mathbb{R}^3$, $j = 1, \dots, n$. Die diskreten Größen $\mathbf{x}_s^{(1)}|_{ni} \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{x}_s^{(1)}|_{ni} = \mathbf{x}_s^{(1)}|_{ni} + \mathbf{U}_s^{(1)}|_{ni} \in \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{x}_t^{(2)}|_{ni} \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{x}_t^{(2)}|_{ni} = \mathbf{x}_t^{(2)}|_{ni} + \mathbf{U}_t^{(2)}|_{ni} \in \mathbb{R}^3$ markieren entsprechende Positionsvektoren eines Slave-Knotens $s \in \mathcal{S}$ bzw. eines Master-Knotens $t \in \mathcal{M}$ in der Referenz- und Momentankonfiguration. Der zur Generierung von $\tilde{g}_r|_{ni}$, $r \in \mathcal{S}$, benötigte knotenspezifische Normalenvektor $\mathbf{n}_r|_{ni} := \mathbf{n}_r(\mathbf{U}_{ni}) \in \mathbb{R}^3$ ist ein Resultat der verfolgten mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie, siehe Abschnitte 5.5.2 und 5.5.3 für weitere Details zur Berechnung von $\mathbf{n}_r|_{ni}$. Die Realisierung der zeitlichen Parametrisierung von $\tilde{g}_r(\mathbf{u})$ in Bezug auf die Generalized- α Methode fällt absolut konform aus. Hierbei resultieren die zeitdiskretisierten Beziehungen

$$\begin{aligned} \tilde{g}_r|_{n+\alpha_f} &:= \tilde{g}_r(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}) = -\mathbf{n}_r^T|_{n+\alpha_f} \tilde{\mathbf{g}}_r|_{n+\alpha_f}, \\ \tilde{\mathbf{g}}_r|_{n+\alpha_f} &:= \tilde{\mathbf{g}}_r(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}) = \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs}|_{n+\alpha_f} \mathbf{x}_s^{(1)}|_{n+\alpha_f} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt}|_{n+\alpha_f} \mathbf{x}_t^{(2)}|_{n+\alpha_f} \end{aligned} \quad (5.463)$$

für $r \in \mathcal{S}$.

Zeitdiskretisierung der gleichheitsrestringierten Normalkontaktbedingungen Unter Beibehaltung der Reihenfolge aus den vorhergehenden Paragraphen wird zunächst die Zeitdiskretisierung der nicht glatten Komplementaritätsfunktion $c_{Nr}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}_r)$, $r \in \mathcal{S}$, anhand eines DIRK-Verfahrens diskutiert. Die zu den semidiskreten KKT-Bedingungen (5.328) äquivalenten gleichheitsrestringierten Normalkontaktbedingungen (5.450) werden durch das Einsetzen der gewichteten Abstandsfunktion $\tilde{g}_r|_{ni}$, siehe Gl. (5.462), und des normalen Anteils

$$\Lambda_{Nr}|_{ni} = \mathbf{n}_r^T|_{ni} \boldsymbol{\Lambda}_r|_{ni} \text{ von } \boldsymbol{\Lambda}_r|_{ni} \in \mathbb{R}^3, \text{ mit } \boldsymbol{\Lambda}_{ni}^T = \{\boldsymbol{\Lambda}_1^T|_{ni}, \dots, \boldsymbol{\Lambda}_{n_S}^T|_{ni}\} \in \mathbb{R}^{n_{us}}, \quad (5.464)$$

in Gl. (5.450) in der Zeit parametrisiert. Dieser Substitutionsschritt liefert das Resultat

$$\mathbf{c}_N|_{ni} := \mathbf{c}_N(\mathbf{u}_{ni}, \boldsymbol{\Lambda}_{ni}) = \bigwedge_{r \in \mathcal{S}} c_{Nr}|_{ni} \in \mathbb{R}^{n_S}, \quad (5.465)$$

$$c_{Nr}|_{ni} := c_{Nr}(\mathbf{u}_{ni}, \boldsymbol{\Lambda}_r|_{ni}) = \Lambda_{Nr}|_{ni} - \max(0, \Lambda_{Nr}|_{ni} - \kappa_N \tilde{g}_r|_{ni}), \quad \kappa_N > 0, \quad r \in \mathcal{S}.$$

Analog zu Gl. (5.309) gehen die diskreten Knotenwerte der Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\Lambda}_r|_{ni} \in \mathbb{R}^3$, $r \in \mathcal{S}$, aus einer auf dem globalen Spaltenvektor $\boldsymbol{\Lambda}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{us}}$ angewendeten Filteroperation hervor. Die entsprechenden Anpassungen in Bezug auf die Verfahrensvorschrift der Generalized- α Methode sind trivial und erfordern lediglich einen Austausch der Stufengrößen in Gl. (5.465) durch $\mathbf{u}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_u}$ und

$$\begin{aligned} \Lambda_{Nr}|_{n+\alpha_f} &= \mathbf{n}_r^T|_{n+\alpha_f} \boldsymbol{\Lambda}_r|_{n+\alpha_f}, \quad \text{mit} \\ \boldsymbol{\Lambda}_r|_{n+\alpha_f} &\in \mathbb{R}^3, \quad \boldsymbol{\Lambda}_{n+\alpha_f}^T = \bigwedge_{r \in \mathcal{S}} \boldsymbol{\Lambda}_r|_{n+\alpha_f} = \{\boldsymbol{\Lambda}_1^T|_{n+\alpha_f}, \dots, \boldsymbol{\Lambda}_{n_S}^T|_{n+\alpha_f}\} \in \mathbb{R}^{n_{us}}. \end{aligned} \quad (5.466)$$

Damit ergibt sich

$$\mathbf{c}_N|_{n+\alpha_f} := \mathbf{c}_N(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}, \boldsymbol{\Lambda}_{n+\alpha_f}) = \bigwedge_{r \in \mathcal{S}} c_{Nr}|_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_S}, \quad (5.467)$$

$$c_{Nr}|_{n+\alpha_f} := c_{Nr}(\mathbf{u}_{n+\alpha_f}, \boldsymbol{\Lambda}_r|_{n+\alpha_f}) = \Lambda_{Nr}|_{n+\alpha_f} - \max(0, \Lambda_{Nr}|_{n+\alpha_f} - \kappa_N \tilde{g}_r|_{n+\alpha_f})$$

für $\kappa_N > 0$ und $r \in \mathcal{S}$.

Zeitdiskretisierung der gewichteten tangentialen Relativgeschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$ Ausgehend von der räumlich objektiven Variante (5.341) der Schlupfrate $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} = \{\tilde{v}_{\xi r}, \tilde{v}_{\eta r}\}^T \in \mathbb{R}^2$, $r \in \mathcal{S}$, soll im folgenden Paragraphen ein inkrementell objektives Relativgeschwindigkeitsmaß für die behandelten Zeitintegrationsverfahren angegeben werden. Hierzu sind die materiellen Zeitableitungen der Mortar-Integrale \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} durch entsprechende Differenzenquotienten zu approximieren. Für die DIRK-Verfahren wird von folgenden Näherungen

$$\begin{aligned} \dot{\hat{D}}_{rs}|_{ni} &:= \frac{\hat{D}_{rs}|_{ni} - \hat{D}_{rs}^S|_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}} \quad \text{und} \quad \dot{\hat{M}}_{rt}|_{ni} := \frac{\hat{M}_{rt}|_{ni} - \hat{M}_{rt}^S|_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}}, \quad \text{mit} \\ \hat{D}_{rs}^S|_{ni} &:= \hat{D}_{rs}(\mathbf{u}_{ni}^S), \quad \hat{M}_{rt}^S|_{ni} := \hat{M}_{rt}(\mathbf{u}_{ni}^S), \end{aligned} \quad (5.468)$$

Gebrauch gemacht, vgl. auch mit Gl. (5.275). Im Fall einer reinen Starrkörperbewegung verhalten sich die in Gl. (5.468) spezifizierten skalaren Differenzenquotienten wegen $\hat{D}_{rs}|_{ni} = \hat{D}_{rs}^S|_{ni} = \text{const.}$ und $\hat{M}_{rt}|_{ni} = \hat{M}_{rt}^S|_{ni} = \text{const.}$ absolut invariant. Nach Einsetzen der Approximationen (5.468) in Gl. (5.341) resultiert unter Berücksichtigung von $\dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs}|_{ni} := \dot{\hat{D}}_{rs}|_{ni} \mathbf{I}_3$ und $\dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt}|_{ni} := \dot{\hat{M}}_{rt}|_{ni} \mathbf{I}_3$ die Beziehung

$$\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}|_{ni} = \left\{ \begin{matrix} \tilde{v}_{\xi r}|_{ni} \\ \tilde{v}_{\eta r}|_{ni} \end{matrix} \right\} := -\boldsymbol{\tau}_r^T|_{ni} \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs}|_{ni} \mathbf{x}_s^{(1)}|_{ni} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt}|_{ni} \mathbf{x}_t^{(2)}|_{ni} \right\}, \quad r \in \mathcal{S}, \quad (5.469)$$

welche die Forderung nach inkrementeller Objektivität befriedigt, siehe hierzu auch [Puso und Laursen, 2004b; Yang et al., 2005; Yang und Laursen, 2007; Puso et al., 2008; Gitterle, 2012; Laursen et al., 2012]. Da zur Beschreibung des reibungsbehafteten Schlupfverhaltens, siehe Gl. (5.337), lediglich in die Tangentialebene von $r \in \mathcal{S}$ projizierte Komponenten- \mathbf{r} ößen Eingang finden, symbolisiert in Gl. (5.469) $\boldsymbol{\tau}_r|_{ni} = [\boldsymbol{\tau}_{\xi r}|_{ni}, \boldsymbol{\tau}_{\eta r}|_{ni}] \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ die aus den orthonormierten Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}_{\xi r}|_{ni} = \boldsymbol{\tau}_{\xi r}(\mathbf{U}_{ni}) \in \mathbb{R}^3$ und $\boldsymbol{\tau}_{\eta r}|_{ni} = \boldsymbol{\tau}_{\eta r}(\mathbf{U}_{ni}) \in \mathbb{R}^3$ aggregierte Projektionsmatrix zum Zeitpunkt T_{ni} . Wie schon in den Paragraphen zuvor erfolgt die Adaptierung von Gl. (5.469) auf die Generalized- α Methode vollkommen konform. Die Definition der Differenzenquotienten

$$\dot{\hat{D}}_{rs}|_{n+\alpha_f} := \frac{\hat{D}_{rs}|_{n+\alpha_f} - \hat{D}_{rs}|_n}{\Delta t_\alpha} \quad \text{und} \quad \dot{\hat{M}}_{rt}|_{n+\alpha_f} := \frac{\hat{M}_{rt}|_{n+\alpha_f} - \hat{M}_{rt}|_n}{\Delta t_\alpha}, \quad \text{mit} \quad (5.470)$$

$$\hat{D}_{rs}|_n := \hat{D}_{rs}(\mathbf{u}_n), \quad \hat{M}_{rt}|_n := \hat{M}_{rt}(\mathbf{u}_n),$$

vgl. auch mit Gl. (5.276), sowie die Berücksichtigung der Abkürzungen

$$\dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs}|_n := \dot{\hat{D}}_{rs}|_n \mathbf{I}_3, \quad \dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt}|_n := \dot{\hat{M}}_{rt}|_n \mathbf{I}_3$$

und

$$\boldsymbol{\tau}_r|_{n+\alpha_f} = [\boldsymbol{\tau}_{\xi r}|_{n+\alpha_f}, \boldsymbol{\tau}_{\eta r}|_{n+\alpha_f}] \in \mathbb{R}^{3 \times 2},$$

$$\boldsymbol{\tau}_{\xi r}|_{n+\alpha_f} = \boldsymbol{\tau}_{\xi r}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}) \in \mathbb{R}^3, \quad \boldsymbol{\tau}_{\eta r}|_{n+\alpha_f} = \boldsymbol{\tau}_{\eta r}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}) \in \mathbb{R}^3$$

führen für den Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ auf den zeitdiskretisierten Komponentenvektor

$$\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}|_{n+\alpha_f} := -\boldsymbol{\tau}_r^T|_{n+\alpha_f} \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \dot{\hat{\mathbf{D}}}_{rs}|_{n+\alpha_f} \mathbf{x}_s^{(1)}|_{n+\alpha_f} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \dot{\hat{\mathbf{M}}}_{rt}|_{n+\alpha_f} \mathbf{x}_t^{(2)}|_{n+\alpha_f} \right\}. \quad (5.471)$$

Im Rahmen einer Zeitdiskretisierung mit der Generalized- α Methode stellt jedoch Gl. (5.471) nicht die einzige Alternative für eine Approximation von $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$ dar. So werten beispielsweise Farah et al. [2015] die gewichtete tangentielle Relativgeschwindigkeit anstatt zum Zeitpunkt $T_{n+\alpha_f}$ am Ende des Zeitintervalls an t_{n+1} in Kombination mit einer einfachen Differenzenquotientenformel vom impliziten Euler-Typ aus. Die Implementierung solch einer Strategie ist allerdings, hinsichtlich des numerischen Aufwands, lediglich bei Verfolgung einer auf Basis einer verallgemeinerten Trapezregel durchgeführten Interpolation für $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ effizient umsetzbar. Des Weiteren ist zu erwarten, dass

die Zusammenführung von einer die zeitkontinuierlichen Bewegungsgleichungen diskretisierenden Generalized- α Methode und von einem für die Behandlung der semidiskreten Kontaktnebenbedingungen (5.450)₃ und (5.450)₄ herangezogenen impliziten Euler-Ansatz in einer Inkonsistenz münden, die die temporale Konvergenzordnung des höher genauen Integrators, also der Generalized- α Methode, degeneriert. Um die aufgezeigten Probleme im Rahmen einer Zeitdiskretisierung mit der Generalized- α Methode abzuwenden, stellen in der vorliegenden Arbeit die in den Gl. (5.470) und (5.471) angegebenen Berechnungsvorschriften die erste Wahl dar.

Zeitdiskretisierung der gleichheitsrestringierten, reibungsbehafteten Tangentialkontaktbedingungen Nachdem im vorherigen Paragraphen eine adäquate zeitdiskretisierte Version einer Schlupfrate hergeleitet wurde, soll diese im Folgenden bei der Zeitdiskretisierung von Gl. (5.451) Anwendung finden. Darüber hinaus werden zur Auswertung von Gl. (5.451) neben den die Kinematik des Interface beschreibenden Größen \tilde{g}_r und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$ der normale und tangential Anteil des am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ vorliegenden Lagrange-Multiplikators $\boldsymbol{\lambda}_r \in \mathbb{R}^3$ benötigt. Bis auf den tangentialen Interfacevektor wurden sämtliche Argumente von $\mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}_r)$, $r \in \mathcal{S}$, in einem der vorhergehenden Paragraphen bereits eingeführt. Zunächst erneut beziehend auf die DIRK-Verfahren ist der tangential Komponentenvektor $\boldsymbol{\Lambda}_{Tr|ni} \in \mathbb{R}^2$ des am Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ lokalisierten diskreten Lagrange-Multiplikators $\boldsymbol{\Lambda}_r|ni \in \mathbb{R}^3$ definiert als

$$\boldsymbol{\Lambda}_{Tr|ni} = \left\{ \begin{array}{l} \Lambda_{\xi r|ni} \\ \Lambda_{\eta r|ni} \end{array} \right\} := \boldsymbol{\tau}_r^T|ni \boldsymbol{\Lambda}_r|ni \in \mathbb{R}^2. \quad (5.472)$$

Nach Substitution von Gl. (5.472) sowie sämtlicher zuvor aufgezählter Approximationen, d. h. $\tilde{g}_r|ni$, $\Lambda_{Nr|ni}$ und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr|ni}$, in die semidiskrete Version der Tangentialkontaktbedingungen (5.451) resultiert der Ausdruck

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{c}}_T|ni &:= \tilde{\mathbf{c}}_T(\mathbf{u}_{ni}, \boldsymbol{\Lambda}_{ni}) = \mathbf{c}_T(\mathbf{u}_{ni}, \mathbf{v}_{ni}(\mathbf{u}_{ni}), \boldsymbol{\Lambda}_{ni}) = \bigwedge_{r \in \mathcal{S}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr|ni} \in \mathbb{R}^{(n_{\text{uUS}} - n_{\text{S}}^n)}, \\ \tilde{\mathbf{c}}_{Tr|ni} &= \left\{ \begin{array}{l} \tilde{c}_{\xi r|ni} \\ \tilde{c}_{\eta r|ni} \end{array} \right\} := \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}(\mathbf{u}_{ni}, \boldsymbol{\Lambda}_r|ni) = \mathbf{c}_{Tr}(\mathbf{u}_{ni}, \mathbf{v}_{ni}(\mathbf{u}_{ni}), \boldsymbol{\Lambda}_r|ni) \\ &= \max(\mu_c(\Lambda_{Nr|ni} - \kappa_N \tilde{g}_r|ni), \|\boldsymbol{\Lambda}_{Tr|ni} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr|ni}\|) \boldsymbol{\Lambda}_{Tr|ni} \\ &\quad - \mu_c \max(0, \Lambda_{Nr|ni} - \kappa_N \tilde{g}_r|ni) \{\boldsymbol{\Lambda}_{Tr|ni} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr|ni}\} \in \mathbb{R}^2, \end{aligned} \quad (5.473)$$

mit $\kappa_N > 0$, $\kappa_\tau > 0$, $r \in \mathcal{S}$. Die Adaptierung der Verfahrensweise für die Generalized- α Methode geschieht absolut analog und manifestiert sich, mit

$$\boldsymbol{\Lambda}_{Tr|n+\alpha_f} = \left\{ \begin{array}{l} \Lambda_{\xi r|n+\alpha_f} \\ \Lambda_{\eta r|n+\alpha_f} \end{array} \right\} := \boldsymbol{\tau}_r^T|n+\alpha_f \boldsymbol{\Lambda}_r|n+\alpha_f, \quad r \in \mathcal{S}, \quad (5.474)$$

in den zeitdiskretisierten Ausdrücken

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{T}}|_{n+\alpha_f} &:= \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{T}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Lambda_{n+\alpha_f}) = \mathbf{c}_{\mathbf{T}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \Lambda_{n+\alpha_f}) = \bigwedge_{r \in \mathcal{S}} \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f}, \quad (5.475) \\
 \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f} &= \left\{ \begin{array}{l} \tilde{c}_{\xi r}|_{n+\alpha_f} \\ \tilde{c}_{\eta r}|_{n+\alpha_f} \end{array} \right\} := \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Lambda_r|_{n+\alpha_f}) = \mathbf{c}_{\mathbf{Tr}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \dot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_f}, \Lambda_r|_{n+\alpha_f}) \\
 &= \max(\mu_c(\Lambda_{Nr}|_{n+\alpha_f} - \kappa_N \tilde{g}_r|_{n+\alpha_f}), \|\Lambda_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f}\|) \Lambda_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f} \\
 &\quad - \mu_c \max(0, \Lambda_{Nr}|_{n+\alpha_f} - \kappa_N \tilde{g}_r|_{n+\alpha_f}) \{\Lambda_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f}\}, \quad \kappa_N > 0, \quad \kappa_\tau > 0.
 \end{aligned}$$

Zeitdiskretisierung der gleichheitsrestringierten, reibungslosen Tangentialkontaktbedingungen Die durchgehende Verwendung eines vektorwertigen Lagrange-Multiplikators $\lambda_r \in \mathbb{R}^3$ an den Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ fordert ihren Tribut, indem auch für ein reibungsloses Kontaktszenario entsprechende Zwangsbedingungen in tangentialer Richtung zu berücksichtigen sind. Im Rahmen der Zeitdiskretisierung mit einem DIRK-Verfahren führt die Forderung nach einem verschwindenden Tangentialspannungsanteil, siehe Gl. (5.448) und (5.452), auf die Definition von

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{T}}|_{ni} &:= \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{T}}(\mathbf{U}_{ni}, \Lambda_{ni}) = \mathbf{c}_{\mathbf{T}}(\mathbf{U}_{ni}, \Lambda_{ni}) = \bigwedge_{r \in \mathcal{S}} \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}|_{ni} \in \mathbb{R}^{(n_{\text{uus}} - n_{\text{S}}^n)}, \\
 \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}|_{ni} &= \left\{ \begin{array}{l} \tilde{c}_{\xi r}|_{ni} \\ \tilde{c}_{\eta r}|_{ni} \end{array} \right\} := \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}(\mathbf{U}_{ni}, \Lambda_r|_{ni}) = \mathbf{c}_{\mathbf{Tr}}(\mathbf{U}_{ni}, \Lambda_r|_{ni}) \\
 &= \Lambda_{\mathbf{Tr}}|_{ni} := \boldsymbol{\tau}_r^{\mathbf{T}}|_{ni} \Lambda_r|_{ni} \in \mathbb{R}^2.
 \end{aligned} \quad (5.476)$$

Unter Austausch der Stufengrößen $\mathbf{U}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ und $\Lambda_r|_{ni} \in \mathbb{R}^3$ gegen $\mathbf{U}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ und $\Lambda_r|_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^3$ erfolgt die Auswertung für die Generalized- α Methode in identischer Art und Weise. Es gilt:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{T}}|_{n+\alpha_f} &:= \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{T}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Lambda_{n+\alpha_f}) = \mathbf{c}_{\mathbf{T}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Lambda_{n+\alpha_f}) = \bigwedge_{r \in \mathcal{S}} \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{(n_{\text{uus}} - n_{\text{S}}^n)}, \\
 \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f} &= \left\{ \begin{array}{l} \tilde{c}_{\xi r}|_{n+\alpha_f} \\ \tilde{c}_{\eta r}|_{n+\alpha_f} \end{array} \right\} := \tilde{\mathbf{c}}_{\mathbf{Tr}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Lambda_r|_{n+\alpha_f}) = \mathbf{c}_{\mathbf{Tr}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \Lambda_r|_{n+\alpha_f}) \\
 &= \Lambda_{\mathbf{Tr}}|_{n+\alpha_f} := \boldsymbol{\tau}_r^{\mathbf{T}}|_{n+\alpha_f} \Lambda_r|_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^2
 \end{aligned} \quad (5.477)$$

Zusammenfassung der mit einem DIRK-Verfahren zeitdiskretisierten Systemgleichungen Aus der Applikation der Verfahrensvorschrift eines DIRK-Verfahren, siehe Abschnitte 5.2.1 und 5.2.2, auf das semidiskrete DAE-System (5.449) folgt in jeder Stufe i , $i = 1, \dots, s$, ein nichtlineares Gleichungssystem der Dimension $n_{\text{uu}} + n_{\text{Q}} + n_{\text{uus}}$ in Abhängigkeit der primalen Variable $\mathbf{U}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, der inneren Variablen $\mathbf{Q}_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\text{Q}}}$ und der dualen Variable $\Lambda_{ni} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uus}}}$. Durch Substitution der Ausdrücke (5.458), (5.465) und (5.473) bzw. (5.476) in Gl. (5.449) resultiert schließlich die folgende zeitdiskretisierte

Version eines nichtlinearen Gleichungssystems

$$\begin{aligned}
 \mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{U}_{ni}, T_{ni}) + \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{0}, \\
 \mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{Q}_{ni}^S}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r}_Q(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{0}, \\
 \mathbf{C}_N(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}) &= \mathbf{0}, \\
 \tilde{\mathbf{C}}_T(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}) &= \mathbf{0},
 \end{aligned} \tag{5.478}$$

mit

$$\mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}, T_{ni}) - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}_{ni}, T_{ni}) + \mathbf{f}_c(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}, \tag{5.479}$$

$$\mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{U}_{ni}, T_{ni}) = \mathbf{M} \frac{\mathbf{U}_{ni} - \hat{\mathbf{U}}_{ni}^S}{\Delta t_n^2 \bar{a}_{ii}} + \bar{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(T_{ni}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}. \tag{5.480}$$

Wie schon in den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 zuvor ist es zweckmäßig, im Rahmen der in der vorliegenden Arbeit verfolgten iterativen Lösungsprozedur zur Behandlung des nichtlinearen Gleichungssystems (5.478), siehe Abschnitt 5.3, eine Aufteilung in global und lokal zugeordnete Gleichungsanteile, d. h. in

$$\mathbf{G}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{C}_N(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}) \\ \tilde{\mathbf{C}}_T(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{\Lambda}_{ni}) \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{W}_{ni} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{U}_{ni} \\ \mathbf{\Lambda}_{ni} \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}, \tag{5.481}$$

$n_{xu} = n_{uu} + n_{uuS}$, und $\mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \in \mathbb{R}^{n_Q}$, vorzunehmen. In Anlehnung an die von Quint [2012] eingeführte Kurznotation (5.481) erhält das nichtlineare algebraische Gleichungssystem (5.478) die kompakte Darstellung

$$\begin{aligned}
 \mathbf{G}(\mathbf{W}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{0}, \\
 \mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) &= \mathbf{0}.
 \end{aligned} \tag{5.482}$$

Zusammenfassung der mit der Generalized- α Methode zeitdiskretisierten Systemgleichungen Die Anwendung der Verfahrensvorschrift für die Generalized- α Methode, siehe Abschnitt 5.2.4, deren strikte Umsetzung mit Hilfe einer Interpolationsregel vom Mittelpunktstyp die Ausdrücke (5.460), (5.467) und (5.475) bzw. (5.477) impliziert, liefert nach Einsetzen der aufgezählten Beziehungen in Gl. (5.449) das nichtlineare algebraische Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
 \mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}) &= \mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_m}) + \\
 &\quad \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) = \mathbf{0}, \\
 \mathbf{L}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}) &= \frac{\mathbf{Q}_{n+\alpha_f} - \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}^S}{\Delta t_\alpha} - \mathbf{r}_Q(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) = \mathbf{0}, \\
 \mathbf{C}_N(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}) &= \mathbf{0}, \\
 \tilde{\mathbf{C}}_T(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}) &= \mathbf{0},
 \end{aligned} \tag{5.483}$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) &= \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) \\ &\quad - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_f}) + \mathbf{f}_c(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}} \end{aligned} \quad (5.484)$$

und

$$\mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_m}) = \mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m} + \overline{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(T_{n+\alpha_m}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}. \quad (5.485)$$

Um Fallunterscheidungen zwischen den DIRK-Integratoren und der Generalized- α Methode im Rahmen der im nachfolgenden Abschnitt 5.7 beschriebenen konsistenten Linearisierung der diskreten Systemgleichungen zu vermeiden, wird das nichtlineare Gleichungssystem (5.483) in Abhängigkeit der $T_{n+\alpha_f} = \alpha_f t_{n+1} + (1 - \alpha_f)t_n$ zugeordneten Systemvektoren $\mathbf{U}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, $\mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uus}}}$ und $\mathbf{Q}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\text{Q}}}$ ausgedrückt. Mittels der Umrechnungen (5.143)₁, (5.165) und (5.461) aus Abschnitt 5.2.4 lassen sich die zuvor genannten Zwischenwerte an der Stelle $T_{n+\alpha_f}$ in die zum Zeitpunkt t_{n+1} gesuchten Größen $\mathbf{u}_{n+1} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, $\mathbf{\lambda}_{n+1} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uus}}}$ und $\mathbf{q}_{n+1} \in \mathbb{R}^{n_{\text{Q}}}$ abbilden. Der diskrete Beschleunigungsvektor $\ddot{\mathbf{U}}_{n+\alpha_m} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, der zur Determinierung der Trägheitskräfte $\mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, T_{n+\alpha_m}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ Anwendung findet, ist gleichermaßen durch Substitution von Gl. (5.143)₁ in Definition (5.149) als Funktion in Abhängigkeit von $\mathbf{U}_{n+\alpha_f} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ spezifizierbar. Die für die vorgeschriebenen Beschleunigungskomponenten $\ddot{\mathbf{u}}(T_{n+\alpha_m}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{up}}}$ hinterlegten Zeitfunktionen sind hingegen an der zeitlichen Zwischenstelle $T_{n+\alpha_m} = t_n + \alpha_m \Delta t_n = \alpha_m t_{n+1} + (1 - \alpha_m)t_n$ auszuwerten, sodass hier bei Gegenüberstellung der Generalized- α Methode mit den DIRK-Integratoren eine geringfügige Modifikation beachtet werden muss. Überdies enthält unter Ausblenden der das jeweilige Zeitdiskretisierungsverfahren anhaftenden Indizes der direkte Vergleich zwischen den Gl. (5.478) und (5.483) die postulierte Identität. Durch Einführen der Gruppierungen

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{W}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}) &= \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}) \\ \mathbf{C}_N(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}) \\ \mathbf{\tilde{C}}_T(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f}) \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}, \\ \mathbf{W}_{n+\alpha_f} &= \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{U}_{n+\alpha_f} \\ \mathbf{\Lambda}_{n+\alpha_f} \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}, \quad \text{mit} \quad n_{\text{xu}} = n_{\text{uu}} + n_{\text{uus}}, \end{aligned} \quad (5.486)$$

ergibt sich die kompakte Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{W}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{U}_{n+\alpha_f}, \mathbf{Q}_{n+\alpha_f}) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.487)$$

5.7 Iterative Lösungsprozedur mittels halbglaten Multilevel-Newton-Algorithmus

Der folgende Abschnitt widmet sich der Lösung des aus der Zeitdiskretisierung mit DIRK-Verfahren bzw. der Generalized- α Methode hervorgehenden nichtlinearen effektiven Strukturgleichungssystems (5.478) bzw. (5.483). Zur Verdichtung und Vereinheitlichung der Schreibweise werden für die folgenden Ausführungen der Index ni , welcher Größen der

i -ten Stufe innerhalb der Verfahrensvorschrift eines DIRK-Verfahrens markiert, sowie der der Generalized- α Methode zugeordnete Index $n + \alpha_f$ ausgeblendet. Dies gestattet beide nichtlinearen Gleichungssysteme (5.478) und (5.483) in die verallgemeinerte Gestalt

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_u(\mathbf{U}, \Lambda, \mathbf{Q}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{C}_N(\mathbf{U}, \Lambda) &= \mathbf{0}, \\ \tilde{\mathbf{C}}_T(\mathbf{U}, \Lambda) &= \mathbf{0}\end{aligned}\tag{5.488}$$

bzw. in die kompakte Darstellung

$$\begin{aligned}\mathbf{G}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) &= \mathbf{0},\end{aligned}\tag{5.489}$$

mit $\mathbf{G}^T(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) = \{\mathbf{G}_u^T(\mathbf{U}, \Lambda, \mathbf{Q}), \mathbf{C}_N^T(\mathbf{U}, \Lambda), \tilde{\mathbf{C}}_T^T(\mathbf{U}, \Lambda)\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$, $\mathbf{W}^T = \{\mathbf{U}^T, \Lambda^T\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$, $n_{xu} = n_{uu} + n_{uuS}$, zu überführen, sodass für die weiteren Ableitungen eine Differenzierung zwischen den zugrunde liegenden Integratoren entfällt.¹³⁹

Um die Eigenschaften des nichtlinear blockstrukturierten Gleichungssystems (5.489) wirksam auszunutzen, findet zur Lösung von Gl. (5.489) das bereits in Abschnitt 5.3 vorgestellte Multilevel-Newton-Verfahren Anwendung. Die iterative Lösungsprozedur setzt dabei die Gültigkeit des Satzes über implizite Funktionen voraus. Im Rahmen dessen Aussage ist es möglich, die dem Gleichungsanteil $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{R}^{n_Q}$, welcher sämtliche zeitdiskretisierte Evolutionsgleichungen der mit dem Rechenmodell assoziierten inelastischen Konstitutivbeziehungen umfasst, zugeordneten inneren Variablen $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ einer effizienten Behandlung zuzuführen. Für vorgegebene Knotenverschiebungen $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ des (m) -ten Iterationsschritts lassen sich mit Hilfe eines in dem globalen Lösungsalgorithmus eingestellten zusätzlichen iterativen Schemas aus Gl. (5.489)₂ aktualisierte innere Variablen $\mathbf{Q}^{(m+1)} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ berechnen:

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \quad \mathbf{Q}^{(m+1)} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{U}^{(m)})\tag{5.490}$$

In einer realen Umsetzung wird der Berechnungsschritt (5.490), infolge der $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ und $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ punktweise anhaftenden Lokalitätseigenschaften an den innerhalb der Kontinuumsselemente e , $e = 1, \dots, n^e$, $n^e = n^{e(1)} + n^{e(2)}$, definierten Gauß-Punkten (k) , $k = 1, \dots, n_{GP}^e$, auf die Lösung von Systeme niedriger Dimension heruntergebrochen. Für weitere Details hierzu und den weiter unten erörterten konsistenten Linearisierungsschritt des diskreten Spannungsalgorithmus sei auf Abschnitt 5.3 verwiesen.

Das Zusammenfügen des Ausdrucks (5.490), der eine Abbildungsvorschrift der Form $\mathbf{Q} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{U})$ imitiert, mit den aus den raum- und zeitdiskretisierten Bewegungsgleichungen sowie den Kontaktbedingungen hervorgehenden globalen Gleichungsanteil (5.489)₁, mündet in der Lösung von

$$\mathbf{G}(\mathbf{W}, \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{U})) = \mathbf{0}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{W}^T = \{\mathbf{U}^T, \Lambda^T\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}.\tag{5.491}$$

¹³⁹Aus der Ersetzung der Argumente \mathbf{U} , Λ , \mathbf{Q} und \mathbf{W} in den Gl. (5.488) und (5.489) durch \mathbf{U}_{ni} , Λ_{ni} , \mathbf{Q}_{ni} und \mathbf{W}_{ni} resultieren die in Bezug auf ein DIRK-Verfahren angegebenen nichtlinearen algebraischen Gleichungssysteme (5.478) und (5.482). Die identische Aussage gilt für die Generalized- α Methode, sobald $\mathbf{W}^T := \{\mathbf{U}^T, \Lambda^T\}$ und \mathbf{Q} durch $\mathbf{W}_{n+\alpha_f}^T := \{\mathbf{U}_{n+\alpha_f}^T, \Lambda_{n+\alpha_f}^T\}$ und $\mathbf{Q}_{n+\alpha_f}$ substituiert werden.

Dem Sachverhalt Rechnung tragend, dass in $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ keine direkten Abhängigkeiten durch die diskreten Lagrange-Multiplikatoren $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ eingehen, ist auch die implizit generierte Abbildung $\mathbf{Q} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{U})$ nur eine Funktion in Abhängigkeit der unbekannten Knotenverschiebungen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$. Im Vergleich zu Abschnitt 5.3 ergeben sich damit einige kleine Modifikationen. Des Weiteren ist offensichtlich, dass sich Gl. (5.491) im Gegensatz zu dem unveränderten nichtlinearen algebraischen Gleichungssystem (5.489) durch eine signifikant reduzierte Systemdimension, nämlich $n_{xu} = n_{uu} + n_{uuS}$ anstatt $n_{xu} + n_Q$, auszeichnet.

Im Rahmen des herangezogenen Multilevel-Newton-Algorithmus wird nun das in Abhängigkeit von $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ deklarierte nichtlineare algebraische Gleichungssystem (5.489)₁ mit Hilfe eines auf globaler Ebene platzierten Newton-Raphson einer iterativen Behandlung zugänglich gemacht. Die Grundlage hierfür bildet das Aufstellen der zugehörigen konsistenten Linearisierung des Residuumsvektors $\mathbf{G}(\mathbf{W}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$. In jedem Iterationsschritt (m) ist dann das folgende linearisierte System von Strukturgleichungen

$$\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{W}^{(m)} = -\mathbf{G}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}), \quad (5.492)$$

mit der an der Stelle $\mathbf{y}^{(m)T} := \{\mathbf{W}^{(m)T}, \mathbf{Q}^{(m+1)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}+n_Q}$ ausgewerteten tangentialen Steifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{W}} + \left[\frac{\partial \mathbf{G} d\hat{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{Q} d\mathbf{U}} \quad \overbrace{\frac{\partial \mathbf{G} d\hat{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{Q} d\mathbf{\Lambda}}}^{0_{n_{xu} \times n_{uuS}}} \right] \right] \Big|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{xu} \times n_{xu}}, \quad (5.493)$$

zu lösen. Neben der Berechnung von $\mathbf{Q}^{(m+1)} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ setzt die Assemblierung des linearen Gleichungssystems (5.492) die Kenntnis der Ableitung $d\hat{\mathbf{Q}}/d\mathbf{U}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_Q \times n_{uu}}$ an der Stelle $\hat{\mathbf{y}}^{(m)T} := \{\mathbf{U}^{(m)T}, \mathbf{Q}^{(m+1)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}+n_Q}$ voraus. Diese ist das Resultat des auf lokaler Ebene durchgeführten konsistenten Linearisierungsschritts, welcher formal als Lösung des linearen Gleichungssystems mit mehreren rechten Seiten

$$\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{L} d\hat{\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{Q} d\mathbf{U}} \right] \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} = \mathbf{0} \Rightarrow \left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \right] \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \left[\frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{U}} \right] \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} = -\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \quad (5.494)$$

wiedergegeben werden kann. Für nähere Details zur Umsetzung von Gl. (5.494) auf Gauß-Punktebene sei auf Abschnitt 5.3 referiert.

5.7.1 Konsistente Linearisierung

Nachdem in Abschnitt 5.7 die Applikation des Multilevel-Newton-Algorithmus auf das allgemeine nichtlineare Gleichungssystem (5.489) besprochen wurde, soll im Folgenden der Fokus auf der Aufstellung des globalen linearisierten Gleichungssystems (5.492) bzw. auf der Durchführung der konsistenten Linearisierung des globalen Residuumsvektors

$$\mathbf{G}^T(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \left\{ \mathbf{G}_u^T(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}), \mathbf{C}_N^T(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}), \tilde{\mathbf{C}}_T^T(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \right\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}, \quad (5.495)$$

mit $\mathbf{Q}^{(m+1)} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{U}^{(m)})$, liegen.

5.7.1.1 Konsistente Linearisierung von \mathbf{G}_u

Die in $\mathbf{G}_u^{(m)} := \mathbf{G}_u(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ zusammengefassten raum- und zeitdiskretisierten Bewegungsgleichungen sind der erste Gleichungsanteil des globalen Spaltenvektors $\mathbf{G}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$, welcher im Rahmen der konsistenten Linearisierungsprozedur detaillierter analysiert werden soll. Hierzu wird zunächst gemäß der in $\mathbf{W}^{(m)T} = \{\mathbf{U}^{(m)T}, \mathbf{\Lambda}^{(m)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$ angeordneten primalen und dualen Variablen, $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ und $\mathbf{\Lambda}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{us}}$, der mit $\mathbf{G}_u(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ assoziierte Teilausschnitt des linearen Gleichungssystems (5.492) zu

$$\mathbf{K}_{uu}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{U}^{(m)} + \mathbf{K}_{u\lambda}|_{\mathbf{u}^{(m)}} \Delta \mathbf{\Lambda}^{(m)} = -\mathbf{G}_u(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}), \quad (5.496)$$

mit

$$\mathbf{K}_{uu}|_{\mathbf{y}^{(m)}} := \left. \frac{d\mathbf{G}_u}{d\mathbf{U}} \right|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{U}} \right] \Big|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}, \quad (5.497)$$

$$\mathbf{K}_{u\lambda}|_{\mathbf{u}^{(m)}} := \left. \frac{d\mathbf{G}_u}{d\mathbf{\Lambda}} \right|_{\mathbf{u}^{(m)}} = \frac{\partial \mathbf{G}_u}{\partial \mathbf{\Lambda}} \Big|_{\mathbf{u}^{(m)}} = \frac{\partial \mathbf{f}_c}{\partial \mathbf{\Lambda}} \Big|_{\mathbf{u}^{(m)}} = \hat{\mathbf{B}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{us}}, \quad (5.498)$$

$$\mathbf{y}^{(m)T} := \{\mathbf{U}^{(m)T}, \mathbf{Q}^{(m+1)T}, \mathbf{\Lambda}^{(m)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{xu} + n_Q},$$

umformuliert. Dabei ist darauf zu achten, dass auch weiterhin nach der Parametrisierung im Zeitbereich die Interfacekräfte $\mathbf{f}_c(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ linear von den diskreten Lagrange-Multiplikatoren $\mathbf{\Lambda}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{us}}$ abhängen. Folglich ist der Funktionalmatrixanteil (5.498), bedingt durch die in $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{us} \times n_{uu}}$ integrierte geometrisch exakte Beschreibung der Kontaktschnittstelle, lediglich an der Stelle $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ auszuwerten. Der globale Tangentenoperator (5.497) ist hingegen zunächst formal in Abhängigkeit sämtlicher Lösungsvariablen zu evaluieren. Abgesehen von den in

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_u(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) &:= \tilde{\mathbf{G}}_u(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) + \mathbf{f}_c(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}), \quad \text{mit} \\ \tilde{\mathbf{G}}_u(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) &:= \mathbf{f}_{\text{kin}}(\mathbf{U}^{(m)}, \hat{T}) + \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}, T) \\ &\quad - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{U}^{(m)}, T) + \mathbf{f}_c(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}), \end{aligned} \quad (5.499)$$

integrierten Kontaktkräften $\mathbf{f}_c(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}) = \hat{\mathbf{B}}^T(\mathbf{U}^{(m)})\mathbf{\Lambda}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ wurden bereits sämtliche verbleibenden, in $\tilde{\mathbf{G}}_u(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ zusammengefassten Summandenterme, hinsichtlich der Konstruktion eines zugehörigen Ableitungsoperator, in Abschnitt 5.4 ausführlich diskutiert. Im Folgenden liegt daher der Fokus auf der Differentiation von $\mathbf{f}_c(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$. Die Separation für die effektiven Bewegungsgleichungen (5.499) impliziert eine Aufspaltung von $\mathbf{K}_{uu}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}$ in

$$\mathbf{K}_{uu}|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \tilde{\mathbf{K}}_{uu}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} + \mathbf{K}_{uu}^{\text{co}}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}}, \quad \text{mit} \quad (5.500)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{uu}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} := \left. \frac{d\tilde{\mathbf{G}}_u}{d\mathbf{U}} \right|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} = \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{G}}_u}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{G}}_u}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{U}} \right] \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}} \quad \text{und} \quad (5.501)$$

$$\mathbf{K}_{uu}^{\text{co}}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} := \left. \frac{d\mathbf{f}_c}{d\mathbf{U}} \right|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} = \frac{\partial \mathbf{f}_c}{\partial \mathbf{U}} \Big|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}, \quad (5.502)$$

$\hat{\mathbf{y}}^{(m)\text{T}} := \{\mathbf{U}^{(m)\text{T}}, \mathbf{Q}^{(m+1)\text{T}}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} + n_{\text{Q}}}$, $\tilde{\mathbf{y}}^{(m)\text{T}} := \mathbf{W}^{(m)\text{T}} = \{\mathbf{U}^{(m)\text{T}}, \mathbf{\Lambda}^{(m)\text{T}}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$. Im Rahmen der Vereinheitlichung des Differentiationsprozesses symbolisieren in Gl. (5.499) \hat{T} und T entsprechende Evaluationszeitpunkte, d. h. $\hat{T} := T_{ni}$ und $T := T_{ni}$ bei der Zeitdiskretisierung mit einem DIRK-Verfahren oder $\hat{T} := T_{n+\alpha_m}$ und $T := T_{n+\alpha_f}$ bei der Zeitdiskretisierung mit der Generalized- α Methode. Gemäß der Definition (5.320) berechnet sich die verschiebungsbezogene Richtungsableitung des Kontaktkraftvektors zu

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{f}_{\text{c}}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{f}_{\text{c}}^{(1)}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \\ \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{f}_{\text{c}}^{(2)}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \end{Bmatrix}, \quad \text{mit} \quad (5.503)$$

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{f}_{\text{c}}^{(1)}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] = \mathbf{A} \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \Lambda_r^{(m)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}, \quad (5.504)$$

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{f}_{\text{c}}^{(2)}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] = - \mathbf{A} \left\{ \sum_{t \in \mathcal{M}} \Lambda_r^{(m)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}}. \quad (5.505)$$

Um den Umfang des vorliegenden Abschnitts so kompakt wie möglich zu halten, werden präzisere Details zur technischen Realisierung der konsistenten Linearisierung der Mortar-Integrale, d. h. von $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$ und $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$, in Abschnitt C.4.4 nachgereicht.

Hinsichtlich einer anschaulichen algebraischen Repräsentation von Gl. (5.492) sowie der damit einhergehenden Schilderung einer effizienten statischen Kondensationsoperation zur Eliminierung der diskreten Lagrange-Multiplikatoren, siehe Abschnitt 5.7.2, soll im weiteren Verlauf von den folgenden Partitionierungen für die unbekannten Knotenverschiebungen

$$\mathbf{U}^{(m)\text{T}} = \left\{ \mathbf{U}_{\text{N}}^{(m)\text{T}}, \mathbf{U}_{\text{S}}^{(m)\text{T}}, \mathbf{U}_{\text{M}}^{(m)\text{T}} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}, \quad \mathbf{U}_{\text{S}}^{(m)\text{T}} = \left\{ \mathbf{U}_{\text{A}}^{(m)\text{T}}, \mathbf{U}_{\text{I}}^{(m)\text{T}} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}, \quad (5.506)$$

und den diskreten dualen Variablen

$$\mathbf{\Lambda}^{(m)\text{T}} = \left\{ \mathbf{\Lambda}_{\text{A}}^{(m)\text{T}}, \mathbf{\Lambda}_{\text{I}}^{(m)\text{T}} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}, \quad (5.507)$$

mit $\mathbf{U}_{\text{N}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuN}}}$, $\mathbf{U}_{\text{S}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}$, $\mathbf{U}_{\text{A}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}}}$, $\mathbf{U}_{\text{I}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}}}$, $\mathbf{U}_{\text{M}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}}$, $\mathbf{\Lambda}_{\text{A}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}}}$, $\mathbf{\Lambda}_{\text{I}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}}}$, $n_{\text{uu}} = n_{\text{uuN}} + n_{\text{uuS}} + n_{\text{uuM}}$, $n_{\text{uuS}} = n_{\text{uuA}} + n_{\text{uuI}}$, $n_{\text{uuS}} = 3 \times n_{\text{S}}^{\text{n}}$, $n_{\text{uuA}} = 3 \times n_{\text{A}}^{\text{n}}$, $n_{\text{uuI}} = 3 \times n_{\text{I}}^{\text{n}}$, $n_{\text{uuM}} = 3 \times n_{\text{M}}^{\text{n}}$, extensiv Gebrauch gemacht werden. Wie schon zu Beginn des Abschnitts 5.5 dargelegt, entsprechen die indizierten Größen $(\cdot)_{\text{N}}$, $(\cdot)_{\text{S}}$ und $(\cdot)_{\text{M}}$ Subvektoren, die von den in die Teilmengen $\mathcal{N} = \{1, 2, \dots, n_{\text{N}}^{\text{n}}\}$, $\mathcal{S} = \{1, 2, \dots, n_{\text{S}}^{\text{n}}\}$ und $\mathcal{M} = \{1, 2, \dots, n_{\text{M}}^{\text{n}}\}$ organisierten $n^{\text{n}} = n_{\text{N}}^{\text{n}} + n_{\text{S}}^{\text{n}} + n_{\text{M}}^{\text{n}}$ Netzknoten abgeleitet sind. Die durch $(\cdot)_{\text{A}}$ und $(\cdot)_{\text{I}}$ gekennzeichneten Objekte symbolisieren primale und duale Freiheitsgradvektoren der im Zusammenhang mit der angewendeten Primal-Dualen Aktiven-Mengen-Strategie ermittelten aktiven und inaktiven Knotensätze, $\mathcal{A}^{(m)} \subset \mathcal{S}$ und $\mathcal{I}^{(m)} = \mathcal{S} \setminus \mathcal{A}^{(m)}$. Es ist weiterhin zu beachten, dass $\mathbf{U}_{\text{N}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuN}}}$ nicht sämtliche dem Knotensatz \mathcal{N} zugeordneten Verschiebungsfreiheitsgrade enthält, sondern nur den entsprechenden Ausschnitt von unbekannten Knotenverschiebungen umfasst.

Die Aufteilungen (5.506) für $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ und (5.507) für $\mathbf{\Lambda}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}$ induzieren in Bezug auf den Residuumsvektor (5.499)₁ sowie die Steifigkeitsmatrizen (5.497), (5.501)

und (5.502) die abstrakten Zerlegungen

$$\mathbf{G}_u(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \begin{Bmatrix} \mathbf{G}_{uN}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \\ \mathbf{G}_{uA}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \\ \mathbf{G}_{uI}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \\ \mathbf{G}_{uM}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \end{Bmatrix}, \quad (5.508)$$

mit $\mathbf{G}_{uN}^{(m)} := \mathbf{G}_{uN}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuN}}$, $\mathbf{G}_{uA}^{(m)} := \mathbf{G}_{uA}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuA}}$,
 $\mathbf{G}_{uI}^{(m)} := \mathbf{G}_{uI}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuI}}$, $\mathbf{G}_{uM}^{(m)} := \mathbf{G}_{uM}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuM}}$,

$$\mathbf{K}_{uu}|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{NN} & \mathbf{K}_{NA} & \mathbf{K}_{NI} & \mathbf{K}_{NM} \\ \mathbf{K}_{AN} & \mathbf{K}_{AA} & \mathbf{K}_{AI} & \mathbf{K}_{AM} \\ \mathbf{K}_{IN} & \mathbf{K}_{IA} & \mathbf{K}_{II} & \mathbf{K}_{IM} \\ \mathbf{K}_{MN} & \mathbf{K}_{MA} & \mathbf{K}_{MI} & \mathbf{K}_{MM} \end{bmatrix} \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}, \quad (5.509)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{NN}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuN}}, & \mathbf{K}_{NA}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuA}}, \\ \mathbf{K}_{NI}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuI}}, & \mathbf{K}_{NM}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuM}}, \\ \mathbf{K}_{AN}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuN}}, & \mathbf{K}_{AA}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuA}}, \\ \mathbf{K}_{AI}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuI}}, & \mathbf{K}_{AM}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuM}}, \\ \mathbf{K}_{IN}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuN}}, & \mathbf{K}_{IA}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuA}}, \\ \mathbf{K}_{II}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuI}}, & \mathbf{K}_{IM}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuM}}, \\ \mathbf{K}_{MN}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuN}}, & \mathbf{K}_{MA}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuA}}, \\ \mathbf{K}_{MI}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuI}}, & \mathbf{K}_{MM}|_{\mathbf{y}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuM}}, \end{aligned}$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{uu}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{K}}_{NN} & \tilde{\mathbf{K}}_{NA} & \tilde{\mathbf{K}}_{NI} & \tilde{\mathbf{K}}_{NM} \\ \tilde{\mathbf{K}}_{AN} & \tilde{\mathbf{K}}_{AA} & \tilde{\mathbf{K}}_{AI} & \tilde{\mathbf{K}}_{AM} \\ \tilde{\mathbf{K}}_{IN} & \tilde{\mathbf{K}}_{IA} & \tilde{\mathbf{K}}_{II} & \tilde{\mathbf{K}}_{IM} \\ \tilde{\mathbf{K}}_{MN} & \tilde{\mathbf{K}}_{MA} & \tilde{\mathbf{K}}_{MI} & \tilde{\mathbf{K}}_{MM} \end{bmatrix} \bigg|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}, \quad (5.510)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{K}}_{NN}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuN}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{NA}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuA}}, \\ \tilde{\mathbf{K}}_{NI}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuI}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{NM}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuN} \times n_{uuM}}, \\ \tilde{\mathbf{K}}_{AN}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuN}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{AA}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuA}}, \\ \tilde{\mathbf{K}}_{AI}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuI}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{AM}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuM}}, \\ \tilde{\mathbf{K}}_{IN}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuN}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{IA}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuA}}, \\ \tilde{\mathbf{K}}_{II}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuI}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{IM}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuI} \times n_{uuM}}, \\ \tilde{\mathbf{K}}_{MN}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuN}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{MA}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuA}}, \\ \tilde{\mathbf{K}}_{MI}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuI}}, & \tilde{\mathbf{K}}_{MM}|_{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuM}}, \end{aligned}$$

und

$$\mathbf{K}_{\text{uu}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\text{AA}}^{\text{co}} & \mathbf{K}_{\text{AI}}^{\text{co}} & \mathbf{K}_{\text{AM}}^{\text{co}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\text{IA}}^{\text{co}} & \mathbf{K}_{\text{II}}^{\text{co}} & \mathbf{K}_{\text{IM}}^{\text{co}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\text{MA}}^{\text{co}} & \mathbf{K}_{\text{MI}}^{\text{co}} & \mathbf{K}_{\text{MM}}^{\text{co}} \end{bmatrix} |_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\text{uu}}}, \quad (5.511)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\text{AA}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuA}}}, & \mathbf{K}_{\text{AI}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuI}}}, & \mathbf{K}_{\text{AM}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuM}}}, \\ \mathbf{K}_{\text{IA}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuA}}}, & \mathbf{K}_{\text{II}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuI}}}, & \mathbf{K}_{\text{IM}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuM}}}, \\ \mathbf{K}_{\text{MA}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}} \times n_{\text{uuA}}}, & \mathbf{K}_{\text{MI}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}} \times n_{\text{uuI}}}, & \mathbf{K}_{\text{MM}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}} \times n_{\text{uuM}}}. \end{aligned}$$

Vor dem Hintergrund einer Vereinfachung der Notation wurde in den vorherigen Abschnitten formal die Deformationsabhängigkeit sämtlicher globaler Interfacegrößen, wie z. B. von $\mathbf{f}_c(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})$, durch $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ kenntlich gemacht. Streng genommen fließen jedoch in die mortar-basierte Kontaktdiskretisierung lediglich globale Verschiebungsfreiheitsgrade auf $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$, präziser artikuliert aus den Subvektoren $\mathbf{U}_S^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}$ und $\mathbf{U}_M^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}}$, ein, sodass sich eine Reihe von individuellen Nullblöcken in der Kontaktsteifigkeitsmatrix $\mathbf{K}_{\text{uu}}^{\text{co}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\text{uu}}}$ manifestieren. Entsprechende Vereinfachungen sind auch auf die Ableitungen anderer globaler Interfacegrößen übertragbar. Zur Verkürzung der Schreibweise werden außerdem die als Index angedeuteten Dimensionen der zumeist rechteckigen Nullmatrizen nicht länger mitgeführt. Dies ist bei der Interpretation von Gl. (5.511) sowie den nachfolgenden Beziehungen zu beachten, in denen $\mathbf{0}$ eine beliebig geformte Nullmatrix repräsentiert. Die Dimension erschließt sich aus dem Kontext. Die mit den diskreten Lagrange-Multiplikatoren assoziierte Funktionalmatrix $\mathbf{K}_{\text{u}\lambda}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\text{uuS}}}$, siehe Gl. (5.498), splittet sich in

$$\mathbf{K}_{\text{u}\lambda}|_{\mathbf{U}^{(m)}} = \hat{\mathbf{B}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{D}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) \\ -\hat{\mathbf{M}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{D}}_{\text{AA}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) & \hat{\mathbf{D}}_{\text{IA}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) \\ \hat{\mathbf{D}}_{\text{AI}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) & \hat{\mathbf{D}}_{\text{II}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) \\ -\hat{\mathbf{M}}_{\text{A}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) & -\hat{\mathbf{M}}_{\text{I}}^T(\mathbf{U}^{(m)}) \end{bmatrix}, \quad (5.512)$$

mit den in aktiven und inaktiven Gleichungsblöcken unterteilten Mortar-Operatoren

$$\hat{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{D}}_{\text{AA}} & \hat{\mathbf{D}}_{\text{AI}} \\ \hat{\mathbf{D}}_{\text{IA}} & \hat{\mathbf{D}}_{\text{II}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{M}} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{M}}_{\text{A}} \\ \hat{\mathbf{M}}_{\text{I}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}, \quad (5.513)$$

$\hat{\mathbf{D}}_{\text{AA}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuA}}}$, $\hat{\mathbf{D}}_{\text{AI}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuI}}}$, $\hat{\mathbf{D}}_{\text{IA}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuA}}}$, $\hat{\mathbf{D}}_{\text{II}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuI}}}$, $\hat{\mathbf{M}}_{\text{A}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuM}}}$, $\hat{\mathbf{M}}_{\text{I}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuM}}}$, auf.

5.7.1.2 Konsistente Linearisierung von \mathbf{C}_N

Auf Basis der im vorherigen Abschnitt eingeführten Definitionen soll nun auch für Gl. (5.488)₃ ein konsistenter Linearisierungsausdruck entwickelt werden. Auf globaler Ebene hat dieser formal die allgemeine Form

$$\mathbf{D}_U \mathbf{C}_N(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] + \mathbf{D}_\Lambda \mathbf{C}_N(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{\Lambda}] = -\mathbf{C}_N(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}), \quad (5.514)$$

mit der negativen rechten Seite $-\mathbf{C}_N(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_S}$ und den noch nicht näher spezifizierten Gateaux-Differentialen

$$D_{\mathbf{U}} \mathbf{C}_N(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^{n_S} \quad \text{und} \quad D_{\mathbf{\Lambda}} \mathbf{C}_N(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)})[\Delta \mathbf{\Lambda}] \in \mathbb{R}^{n_S}.$$

Das Konzept der Richtungsableitung dient in der vorliegenden Arbeit dazu, die benötigten globalen Funktionaloperatoren zu extrahieren. Heruntergebrochen auf einen einzelnen Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ nimmt Gl. (5.514) die Gestalt

$$D_{\mathbf{U}} c_{Nr}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}_r^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] + D_{\mathbf{\Lambda}_r} c_{Nr}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}_r^{(m)})[\Delta \mathbf{\Lambda}_r] = -c_{Nr}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}_r^{(m)}) \quad (5.515)$$

an. Unter Berücksichtigung der nichtlinearen Komplementaritätsfunktion in normaler Richtung

$$c_{Nr}^{(m)} := c_{Nr}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}_r^{(m)}) = \Lambda_{Nr}^{(m)} - \max(0, \Lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}), \quad \kappa_N > 0, \quad (5.516)$$

vgl. Definition (5.443), resultiert

$$\begin{aligned} & \mathbf{\Lambda}_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + \mathbf{n}_r^{(m)T} \Delta \mathbf{\Lambda}_r^{(m)} \\ & - \chi_N(\tilde{g}_r^{(m)}, \Lambda_{Nr}^{(m)}) \left(\mathbf{\Lambda}_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + \mathbf{n}_r^{(m)T} \Delta \mathbf{\Lambda}_r^{(m)} - \kappa_N D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \right) \\ & = -\Lambda_{Nr}^{(m)} + \max(0, \Lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \quad \forall r \in \mathcal{S}, \end{aligned} \quad (5.517)$$

mit der Ableitung

$$\chi_N : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (\tilde{g}, \Lambda_N) \mapsto y = \chi_N(\tilde{g}, \Lambda_N) := \begin{cases} 1 & \text{für } (\Lambda_N - \kappa_N \tilde{g}) > 0 \\ 0 & \text{für } (\Lambda_N - \kappa_N \tilde{g}) \leq 0 \end{cases} \quad (5.518)$$

der halbglatte Funktion $\max(0, \Lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)})$ und den eingeführten Abkürzungen $\mathbf{n}_r^{(m)} := \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^3$, $\tilde{g}_r^{(m)} := \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})$, $\Lambda_{Nr}^{(m)} = \mathbf{n}_r^{(m)T} \mathbf{\Lambda}_r^{(m)}$. Unter Verweis auf die in Gl. (5.445) angegebene allgemeine Funktionsdefinition der max-Funktion stimmt die in Abhängigkeit der Argumente \tilde{g} und Λ_N ausgedrückte charakteristische Abbildung (5.518) mit der verallgemeinerten Ableitung des max-Operators

$$\frac{\partial}{\partial x} \max(s, x) : \mathbb{R} \rightarrow [-1, 1], \quad x \mapsto y = \frac{\partial}{\partial x} \max(s, x) := \begin{cases} 1 & \text{für } x > s \\ 0 & \text{für } x \leq s \end{cases}, \quad s \in \mathbb{R}, \quad (5.519)$$

für $s := 0$ und $x := \Lambda_N - \kappa_N \tilde{g}$ überein. Diese im Zusammenhang mit der konsistenten Linearisierung von $c_{Nr}^{(m)}$, $r \in \mathcal{S}$, eingeführte Fallunterscheidung (5.518) gestattet explizit eine Separierung von \mathcal{S} in aktive und inaktive Kontaktknoten innerhalb des aktuellen Newton-Schrittes (m) vorzunehmen. Eine Aktualisierung der im Verlauf der iterativen Lösungsprozedur zu determinierenden Knotensätze $\mathcal{A}^{(m)} \subset \mathcal{S}$ und $\mathcal{I}^{(m)} = \mathcal{S} \setminus \mathcal{A}^{(m)}$ erfolgt gemäß

$$\mathcal{A}^{(m)} = \left\{ r \in \mathcal{S} \mid \chi_N(\tilde{g}_r^{(m)}, \lambda_{Nr}^{(m)}) = 1 \right\}, \quad (5.520)$$

$$\mathcal{I}^{(m)} = \left\{ r \in \mathcal{S} \mid \chi_N(\tilde{g}_r^{(m)}, \lambda_{Nr}^{(m)}) = 0 \right\}. \quad (5.521)$$

Damit münden die mit den Aktualisierungsvorschriften (5.520) und (5.521) für die slave-seitigen Knotensätze $\mathcal{A}^{(m)}$ und $\mathcal{I}^{(m)}$ einhergehenden und aus Gl. (5.517) zu extrahierenden, konsistent linearisierten Kopplungsbeziehungen in den kompakten Ausdrücken

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] = -\tilde{g}_r^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{A}^{(m)}, \quad (5.522)$$

$$\Lambda_r^{(m)\text{T}} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] + \mathbf{n}_r^{(m)\text{T}} \Delta \Lambda_r^{(m)} = -\Lambda_{Nr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{I}^{(m)}. \quad (5.523)$$

Mit dem Blick zunächst nur auf die linearisierten Nichtdurchdringungsbedingungen (5.522) an allen aktiven Slave-Knoten $r \in \mathcal{A}^{(m)}$ gerichtet, gelingt es Gl. (5.522) durch Assemblierung von $\tilde{g}_r^{(m)}$, $r \in \mathcal{A}^{(m)}$, in den globalen Spaltenvektor

$$\tilde{\mathbf{g}}_A^{(m)} := \tilde{\mathbf{g}}_A(\mathbf{U}^{(m)}) = \sum_{r \in \mathcal{A}^{(m)}} \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuA}} \quad (5.524)$$

ganzheitlich als

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{g}}_A(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] = [\mathbf{N}_{uA} \quad \mathbf{N}_{\lambda A}]|_{\mathbf{U}^{(m)}} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \Lambda^{(m)} \end{Bmatrix} = -\tilde{\mathbf{g}}_A^{(m)}, \quad (5.525)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{uA}|_{\mathbf{U}^{(m)}} &= [\mathbf{N}_{uAN} \quad \mathbf{N}_{uAA} \quad \mathbf{N}_{uAI} \quad \mathbf{N}_{uAM}]|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uu}}, \quad \mathbf{N}_{uAN} = \mathbf{0}, \\ \mathbf{N}_{\lambda A} &= [\mathbf{N}_{\lambda AA} \quad \mathbf{N}_{\lambda AI}] = \mathbf{0}, \quad \mathbf{N}_{\lambda AA} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{N}_{\lambda AI} = \mathbf{0}, \end{aligned}$$

umzuschreiben. Die nicht zu Nullblöcken kollabierenden Funktionalmatrizen

$$\mathbf{N}_{uAA} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uuA}}, \quad \mathbf{N}_{uAI} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uuI}}, \quad \text{und} \quad \mathbf{N}_{uAM} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uuM}}$$

repräsentieren dabei das Resultat der Assemblierung aller in $D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$, $r \in \mathcal{A}^{(m)}$, enthaltenen Richtungsableitungen. Abschnitt C.4 widmet sich der algorithmischen Umsetzung dieses Gateaux-Differentials. Den Sachverhalt zur Kenntnis nehmend, dass die einzuhaltenden geometrischen Randbedingungen $\tilde{g}_r^{(m)} = 0$ für $r \in \mathcal{A}^{(m)}$ keinerlei Abhängigkeiten durch die diskreten Lagrange-Multiplikatoren $\Lambda_r^{(m)}$, $r \in \mathcal{A}^{(m)}$, aufweisen, entfalten auch sämtliche partiellen Ableitungen von $\tilde{\mathbf{g}}_A^{(m)}$ nach $\Lambda^{(m)}$. Konsequenterweise hat dies die Nullblöcke $\mathbf{N}_{\lambda A} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uuS}}$, $\mathbf{N}_{\lambda AA} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uuA}}$ und $\mathbf{N}_{\lambda AI} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uuI}}$ in Gl. (5.525) zur Folge. Insbesondere die Feststellung $\mathbf{N}_{\lambda AA} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_A^n \times n_{uuA}}$ stellt dabei eine charakteristische Eigenschaft bei der Lösung eines Sattelpunktproblems dar, die sich beispielsweise ungünstig auf das Konvergenzverhalten eines iterativen Gleichungslösers auswirkt. Infolge der vektorwertigen Gestalt der diskreten Lagrange-Multiplikatoren $\Lambda_r^{(m)} \in \mathbb{R}^3$, $r \in \mathcal{A}^{(m)}$, ist es zweckmäßig, die linearisierten Spannungsrandbedingungen (5.523) in normaler Richtung an den inaktiven Slave-Knoten $r \in \mathcal{I}^{(m)}$ mit den entsprechenden Tangentialkontaktbedingungen an $r \in \mathcal{I}^{(m)}$ zu kombinieren. Eine analoge gesamtheitliche Behandlung von Gl. (5.523) wird aus diesem Grund in dem nachfolgenden Abschnitt 5.7.1.3 diskutiert.

In der einschlägigen Literatur ist auch von der Anwendung eines semiglattem Newton-Verfahrens die Rede, da in Bezug auf die nichtlineare Komplementaritätsfunktion (5.443) ein Freilegen der inhärent im max-Operator enthaltenen Aufteilung in die zwei Lösungsbereiche erst durch Applikation eines Newton-Typ artigen Lösungsschemas vollzogen

wird und die max-Funktion (5.445) im Rahmen beschränkter Optimierungsprobleme in die Klasse der halbglaten Abbildungen einzuordnen ist, siehe hierzu exemplarisch [Qi und Sun, 1993; Christensen et al., 1998; Hintermüller et al., 2003; Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Popp et al., 2012; Popp, 2012; Gitterle, 2012] für weitere Details. Aufgrund der Integration allgemeinerer Konstitutivmodelle vom Evolutionsgleichungstyp in das nichtlineare effektive Strukturgleichungssystem (5.488) wird jedoch in der vorliegenden Arbeit für die gesamtheitliche iterative Lösungsmethodik die Terminologie halbglatte Mehrebenen-Newton-Verfahren verwendet.

5.7.1.3 Konsistente Linearisierung von $\tilde{\mathbf{C}}_T$

Die konsistente Linearisierung der tangentialen Kopplungsbedingungen lässt sich auf globaler Ebene formal als

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{C}}_T(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda} \tilde{\mathbf{C}}_T(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)})[\Delta \Lambda] = -\tilde{\mathbf{C}}_T(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}) \quad (5.526)$$

spezifizieren. Unter Beibehaltung einer kongruenten Verfahrensweise wie in Abschn. 5.7.1.2 wird Gl. (5.526) zum Zweck der Veranschaulichung einer algorithmischen Umsetzung in die zugehörige knotenspezifische Beziehung

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{C}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda_r^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{C}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda_r^{(m)})[\Delta \Lambda_r] = -\tilde{\mathbf{C}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda_r^{(m)}) \quad \forall r \in \mathcal{S} \quad (5.527)$$

überführt. Eine Konkretisierung der $\tilde{\mathbf{C}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda_r^{(m)})$, $r \in \mathcal{S}$, zugrunde liegenden Gleichungsstrukturen und die damit einhergehende Ausgestaltung der konsistenten Linearisierungsvorschriften für den reibungslosen und reibungsbehafteten Tangentialkontakt erfolgt in den nachfolgenden beiden Paragraphen.

Konsistente Linearisierung der gleichheitsrestringierten reibungslosen Tangentialkontaktbedingungen Die konsistente Linearisierung der reibungslosen Tangentialkontaktbedingungen (5.448) liefert für den dreidimensionalen Fall an jedem Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ zwei skalare Komponentengleichungen, d. h.

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \\ \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \end{array} \right\} + \boldsymbol{\tau}_r^{(m)T} \Delta \Lambda_r^{(m)} = -\Lambda_{Tr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{A}^{(m)}, \quad (5.528)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \\ \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \end{array} \right\} + \boldsymbol{\tau}_r^{(m)T} \Delta \Lambda_r^{(m)} = -\Lambda_{Tr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{I}^{(m)}, \quad (5.529)$$

mit $\boldsymbol{\tau}_r^{(m)} := [\boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)}, \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)}] \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$, $\boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)} := \boldsymbol{\tau}_{\xi r}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^3$, $\boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)} := \boldsymbol{\tau}_{\eta r}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^3$ und $\Lambda_{Tr}^{(m)} := \boldsymbol{\tau}_r^{(m)T} \Lambda_r^{(m)} = \{\Lambda_{\xi r}^{(m)}, \Lambda_{\eta r}^{(m)}\}^T \in \mathbb{R}^2$. Im \mathbb{R}^2 reduzieren sich die Gl. (5.528) und (5.529) auf die skalaren, knotenspezifischen Beziehungen:

$$\Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + \boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)T} \Delta \Lambda_r^{(m)} = -\Lambda_{\xi r}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{A}^{(m)}, \quad (5.530)$$

$$\Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)T} \Delta \Lambda_r^{(m)} = -\Lambda_{\eta r}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{I}^{(m)} \quad (5.531)$$

Da die Gl. (5.530) und (5.531) für den zweidimensionalen Fall unkompliziert aus den Aussagen (5.528) und (5.529) im \mathbb{R}^3 abgeleitet werden können, soll im Folgenden nur das allgemeinere zuletzt genannte Szenario Beachtung finden.

Zur Entwicklung einer globalen algebraischen Gleichungsstruktur für Gl. (5.528) werden die tangentialen Komponentenvektoren der diskreten Lagrange-Multiplikatoren $\Lambda_{Tr}^{(m)}$ an sämtlichen aktiven Slave-Knoten $r \in \mathcal{A}^{(m)}$ in den Spaltenvektor

$$\begin{aligned} \Lambda_{TA}^{(m)} &:= \Lambda_{TA}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}) = \mathbf{A}_{r \in \mathcal{A}^{(m)}} \Lambda_{Tr}^{(m)} \\ &= \tau_A|_{\mathbf{U}^{(m)}} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n_{uuA}} & \mathbf{0}_{n_{uuA} \times n_{uuI}} \end{bmatrix} \Lambda^{(m)} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA}} \end{aligned} \quad (5.532)$$

der Dimension $\hat{n}_{uuA} = n_{uuA} - n_A^n$, mit

$$\tau_A|_{\mathbf{U}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \tau_1^{(m)T} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tau_2^{(m)T} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \tau_{n_A^n}^{(m)T} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuA}}, \quad (5.533)$$

einsortiert. Auf Basis der globalen Aggregationsvorschrift (5.532) ist es nun möglich, die konsistente Linearisierung der reibungslosen Tangentialkontaktbedingungen für $r \in \mathcal{A}^{(m)}$ in Form von

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \Lambda_{TA}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda} \Lambda_{TA}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)})[\Delta \Lambda] \\ = [\mathbf{T}_{uA} \quad \mathbf{T}_{\lambda A}]|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \Lambda^{(m)} \end{Bmatrix} = -\Lambda_{TA}^{(m)}, \end{aligned} \quad (5.534)$$

mit den Funktionalmatrixblöcken

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{uA}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{uAN} \quad \mathbf{T}_{uAA} \quad \mathbf{T}_{uAI} \quad \mathbf{T}_{uAM}]|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uu}}, \\ \mathbf{T}_{\lambda A}|_{\mathbf{U}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{\lambda AA} \quad \mathbf{T}_{\lambda AI}]|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuS}}, \\ \mathbf{T}_{uAN} &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{T}_{uAM} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{T}_{\lambda AA}|_{\mathbf{U}^{(m)}} = \tau_A|_{\mathbf{U}^{(m)}}, \quad \mathbf{T}_{\lambda AI} = \mathbf{0}, \end{aligned}$$

anzugeben. Zum Aufbau des Operators $\mathbf{T}_{uA}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uu}}$ werden die mit $\Lambda_r^{(m)} \in \mathbb{R}^3$ skalar multiplizierten Verschiebungsableitungen der Tangentenvektoren aller aktiven Slave-Kontaktknoten auf die Teilblöcke

$$\mathbf{T}_{uAA}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuA}} \quad \text{und} \quad \mathbf{T}_{uAI}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuI}}$$

aufgeteilt. Der verschwindende Matrixblock $\mathbf{T}_{uAN} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuN}}$ ist das Resultat der dem Subvektor $\mathbf{U}_N^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuN}}$, welcher nicht an der beschriebenen mortar-basierten Kontaktdiskretisierung teilnimmt, zugeordneten Ableitungen. Weiterhin ist unter Konsultation der Abschnitte 5.5.2 und 5.5.3 ersichtlich, dass auch die Verschiebungsfreiheitsgrade auf $\gamma_c^{h(2)}$ bei der Generierung der knotenspezifischen Tangentialbasis in $r \in \mathcal{A}^{(m)}$

nicht involviert sind. Konsequenterweise reduzieren sich damit sämtliche Einträge in $\mathbf{T}_{\text{uAM}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuM}}}$ zu Null. Die Berechnung von

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3 \quad \text{und} \quad \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3 \quad \text{für} \quad r \in \mathcal{A}^{(m)}$$

wird in Abschnitt C.4 eingehend thematisiert. Der aus $\mathbf{T}_{\lambda\text{A}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuS}}}$ extrahierte Funktionaloperator $\mathbf{T}_{\lambda\text{AA}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuA}} \times n_{\text{uuA}}}$ und mit dem aktiven Teil der diskreten Lagrange-Multiplikatoren assoziierte Teilausschnitt greift lediglich auf die Beschreibung der Tangentialbasis durch $\boldsymbol{\tau}_r^{(m)}$, $r \in \mathcal{A}^{(m)}$, vgl. Gl. (5.533), zurück.

Wie bereits in Abschnitt 5.7.1.2 angekündigt, werden an den inaktiven Slave-Knoten $r \in \mathcal{I}^{(m)}$ die linearisierten Spannungsrandbedingungen in normaler und tangentialer Richtung (5.523) und (5.531) zusammengefasst. Es ist leicht einzusehen, dass die Forderung nach $\{\boldsymbol{\Lambda}_{\text{Nr}}^{(m)}, \boldsymbol{\Lambda}_{\text{Tr}}^{(m)\text{T}}\}^{\text{T}} = \mathbf{0}$, $r \in \mathcal{I}^{(m)}$, äquivalent zu $\boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)} = \mathbf{0}$, $r \in \mathcal{I}^{(m)}$, ist. Dieser Sachverhalt impliziert die triviale Linearisierungsvorschrift

$$\Delta \boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)} = -\boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{I}^{(m)} \quad (5.535)$$

bzw. wegen

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\text{I}}^{(m)} = \mathbf{A}_{r \in \mathcal{I}^{(m)}} \boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)} = [\mathbf{0}_{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuA}}} \quad \mathbf{I}_{n_{\text{uuI}}}] \boldsymbol{\Lambda}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}}}$$

das aggregierte lineare Gleichungssystem

$$[\mathbf{0}_{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uu}}} \quad \mathbf{0}_{n_{\text{uuI}} \times n_{\text{uuA}}} \quad \mathbf{I}_{n_{\text{uuI}}}] \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \boldsymbol{\Lambda}^{(m)} \end{Bmatrix} = -\boldsymbol{\Lambda}_{\text{I}}^{(m)}. \quad (5.536)$$

Die Fusion der linearisierten Kontaktbedingungen (5.523) und (5.529) für $r \in \mathcal{I}^{(m)}$ induziert natürlich auch eine Änderung der Reihenfolge in dem eingangs zu Abschnitt 5.7.1 postulierten globalen Residuumsvektor (5.495). Für die weiteren Ausführungen wird der Ausdruck (5.495) daher durch

$$\mathbf{G}^{\text{T}}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \left\{ \mathbf{G}_{\text{u}}^{(m)\text{T}}, \tilde{\mathbf{g}}_{\text{A}}^{(m)\text{T}}, \tilde{\mathbf{c}}_{\text{TA}}^{(m)\text{T}}, \tilde{\mathbf{c}}_{\text{TI}}^{(m)\text{T}} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}, \quad (5.537)$$

mit $\tilde{\mathbf{c}}_{\text{TA}}^{(m)} := \boldsymbol{\Lambda}_{\text{TA}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuA}}}$ und $\tilde{\mathbf{c}}_{\text{TI}}^{(m)} := \boldsymbol{\Lambda}_{\text{I}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuI}}}$, substituiert.

Konsistente Linearisierung der gleichheitsrestringierten reibungsbehafteten Tangentialkontaktbedingungen In der vorliegenden Monographie gelingt die Modellierung des Coulombschen Reibmodells im diskretisierten Kontakt-Interface mit Hilfe der nichtlinearen Komplementaritätsfunktion (5.446), die sich für den Einbau in das effektive Strukturgleichungssystem (5.488) in der Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{c}}_{\text{Tr}}^{(m)} &:= \tilde{\mathbf{c}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U}^{(m)}, \boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)}) = \max \left(\mu_c (\lambda_{\text{Nr}}^{(m)} - \kappa_{\text{N}} \tilde{g}_r^{(m)}), \|\boldsymbol{\Lambda}_{\text{Tr}}^{(m)} + \kappa_{\tau} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}^{(m)}\| \right) \boldsymbol{\Lambda}_{\text{Tr}}^{(m)} \\ &\quad - \mu_c \max(0, \lambda_{\text{Nr}}^{(m)} - \kappa_{\text{N}} \tilde{g}_r^{(m)}) \left\{ \boldsymbol{\Lambda}_{\text{Tr}}^{(m)} + \kappa_{\tau} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}^{(m)} \right\} \in \mathbb{R}^2, \\ &\quad \kappa_{\text{N}} > 0, \quad \kappa_{\tau} > 0, \quad \forall r \in \mathcal{S}, \end{aligned} \quad (5.538)$$

mit den tangentialen Komponentenvektoren $\mathbf{\Lambda}_{Tr}^{(m)} := \boldsymbol{\tau}_r^{(m)T} \mathbf{\Lambda}_r^{(m)} = \{\Lambda_{\xi_r}^{(m)}, \Lambda_{\eta_r}^{(m)}\}^T \in \mathbb{R}^2$ und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} := \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)}) = \{\tilde{v}_{\xi_r}^{(m)}, \tilde{v}_{\eta_r}^{(m)}\}^T \in \mathbb{R}^2$, präsentiert. Im Rahmen der verfolgten iterativen Vorgehensweise manifestiert sich die konsistente Linearisierung von Gl. (5.538) in einer Aufteilung des aktiven Slave-Knotensatzes $\mathcal{A}^{(m)}$ in die Untermengen

$$\mathcal{H}^{(m)} = \left\{ r \in \mathcal{A}^{(m)} \mid \mu_c(\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) > \|\mathbf{\Lambda}_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\| \right\} \quad \text{und} \quad (5.539)$$

$$\mathcal{G}^{(m)} = \left\{ r \in \mathcal{A}^{(m)} \mid \mu_c(\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \leq \|\mathbf{\Lambda}_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\| \right\}. \quad (5.540)$$

Gemäß der in der vorliegenden Arbeit verwendeten Notation kennzeichnet $\mathcal{G}^{(m)} \subset \mathcal{A}^{(m)}$ den Ausschnitt der aktuell n_G^n gleitenden Slave-Knoten auf $\gamma_c^{h(1)}$ und $\mathcal{H}^{(m)} = \mathcal{A}^{(m)} \setminus \mathcal{G}^{(m)}$ umfasst das n_H^n starke Kontingent von haftenden Kontaktknoten der aktuellen Iteration (m) . Um die Separierungs- bzw. Aktualisierungsvorschriften (5.539) und (5.540) aus dem totalen Differential von Gl. (5.538) zu extrahieren, ist inhärent in der tangentialen Komplementaritätsfunktion (5.538) zusätzlich die Fallunterscheidung in

$$\mathcal{A}^{(m)} = \left\{ r \in \mathcal{S} \mid (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) > 0 \right\} \quad \text{und} \quad (5.541)$$

$$\mathcal{I}^{(m)} = \left\{ r \in \mathcal{S} \mid (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \leq 0 \right\} \quad (5.542)$$

eingebettet. Obwohl die Einteilung in Form der Aussagen (5.541) und (5.542) unabhängig von der aus der konsistenten Linearisierung der normalen Komplementaritätsfunktion (5.516) resultierenden Zerlegung in $\mathcal{A}^{(m)}$ und $\mathcal{I}^{(m)}$, siehe Abschnitt 5.7.1.2, formuliert wird, liefert sie identische aktive und inaktive Knotensätze. Es ist offensichtlich, dass dieser Sachverhalt eine bisher noch nicht vorgetragene, einzuhaltende Grundvoraussetzung bei der Verfolgung solch einer erweiterten PDASS zur Behandlung von reibungsbehafteten Kontaktproblemen darstellt. Erst hierdurch wird die Kopplung der nichtlinearen Komplementaritätsfunktionen (5.516) und (5.538) möglich. Zum Zweck einer prägnanten Schilderung wird auf umfangreiche Herleitungen der Aussagen (5.539) bis (5.542) verzichtet. Sie sind jedoch allesamt aus mühsamen Umformungen der von Gl. (5.538) abgeleiteten linearisierten Form, d. h. aus

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\mathbf{\Lambda}_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{\Lambda}_r] = -\tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{S}, \quad (5.543)$$

extrahierbar.

Infolge der Vereinigung $\mathcal{A}^{(m)} = \mathcal{G}^{(m)} \cup \mathcal{H}^{(m)}$ können nur aktive Knoten $r \in \mathcal{A}^{(m)}$ Stick-Slip Effekten (Rutschhaftung) unterliegen. Damit müssen konsistente Linearisierungs- ausdrücke für Gl. (5.538) lediglich auf den drei, in Form von kollozierten Slave-Knoten gebildeten Teilbereichen $\mathcal{G}^{(m)}$, $\mathcal{H}^{(m)}$ und $\mathcal{I}^{(m)}$, die zusammen den unveränderlichen Knotensatz $\mathcal{S} = \mathcal{G}^{(m)} \cup \mathcal{H}^{(m)} \cup \mathcal{I}^{(m)}$ definieren, spezifiziert werden. Für aktuell sich in Kontakt befindende und haftende Slave-Knoten $r \in \mathcal{H}^{(m)}$ des (m) -ten Berechnungsdurchlaufs resultiert die Beziehung

$$-\frac{1}{\mu_c \kappa_\tau} \left\{ D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\mathbf{\Lambda}_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{\Lambda}_r] \right\} = \frac{1}{\mu_c \kappa_\tau} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{H}^{(m)}, \quad (5.544)$$

mit den Richtungsableitungen

$$\begin{aligned}
 & D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] \\
 &= -\mu_c \kappa_\tau \left(\left(D_{\Lambda_r} \Lambda_{Nr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] + D_{\mathbf{U}} \Lambda_{Nr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] - \kappa_N D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \right) \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \right. \\
 &\quad \left. + (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \right) \quad \forall r \in \mathcal{H}^{(m)} \quad (5.545)
 \end{aligned}$$

und der rechten Seite

$$\tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)} = -\mu_c \kappa_\tau (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{H}^{(m)}. \quad (5.546)$$

Zur Beseitigung des konstanten Vorfaktors $-\mu_c \kappa_\tau$ in Gl. (5.545) und (5.546) wird Gl. (5.543) für $r \in \mathcal{H}^{(m)}$ mit dem inversen Skalar $-1/(\mu_c \kappa_\tau) \neq 0$ multipliziert. Es ergibt sich die angegebene Beziehung (5.544). Der Fall des Gleitens bzw. des Schlupfs liefert den komplexen konsistenten Linearisierungsausdruck

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] = -\tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{G}^{(m)}, \quad (5.547)$$

mit dem Funktionaloperator

$$\begin{aligned}
 & D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] = \\
 & \left[\Lambda_{Tr}^{(m)} \left\{ \frac{\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}}{\|\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\|} \right\}^T \right] \left\{ D_{\Lambda_r} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] + D_{\mathbf{U}} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + \kappa_\tau D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \right\} \\
 & + \|\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\| \left\{ D_{\Lambda_r} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] + D_{\mathbf{U}} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \right\} \quad (5.548) \\
 & - \mu_c \left\{ \left(D_{\Lambda_r} \Lambda_{Nr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] + D_{\mathbf{U}} \Lambda_{Nr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] - \kappa_N D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \right) \left\{ \Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \right\} \right. \\
 & \left. + (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \left\{ D_{\Lambda_r} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] + D_{\mathbf{U}} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + \kappa_\tau D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \right\} \right\} \quad \forall r \in \mathcal{G}^{(m)}
 \end{aligned}$$

und dem knotenspezifischen Residuumvektor

$$\tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)} = \|\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\| \Lambda_{Tr}^{(m)} - \mu_c (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \left\{ \Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \right\} \quad \forall r \in \mathcal{G}^{(m)}. \quad (5.549)$$

Wird ein Slave-Knoten als inaktiv eingestuft, obliegt er in tangentialer Richtung der Forderung $\Lambda_{Tr}^{(m)} = \mathbf{0}$, $r \in \mathcal{I}^{(m)}$. Analog zu Gl. (5.529) impliziert solch ein Szenario die linearisierte Beziehung

$$\left\{ \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi_r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \right\} + \boldsymbol{\tau}_r^{(m)T} \Delta \Lambda_r^{(m)} = -\Lambda_{Tr}^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{I}^{(m)}. \quad (5.550)$$

Um zu einer adäquaten Beschreibung der linearisierten Haft- und Schlupfbedingungen auf globaler Ebene, welche direkt in das lineare Gleichungssystem (5.492) übernommen werden kann, zu gelangen, sind die Ausdrücke (5.544) und (5.547) in Bezug auf die

Richtungsableitungen der diskreten Lagrange-Multiplikatoren noch zu vereinfachen. Hierfür sollen die folgenden Identitäten ausgenutzt werden:

$$D_{\mathbf{U}} \Lambda_{Nr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] = \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}], \quad D_{\Lambda_r} \Lambda_{Nr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] = \mathbf{n}_r^{(m)T} \Delta \Lambda_r^{(m)}, \quad (5.551)$$

$$D_{\mathbf{U}} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] = \left\{ \begin{array}{l} \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \\ \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \end{array} \right\}, \quad D_{\Lambda_r} \Lambda_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] = \boldsymbol{\tau}_r^{(m)T} \Delta \Lambda_r^{(m)} \quad (5.552)$$

Auf Basis dieser Ausdrücke lassen sich die in Form von Gateaux-Differentialen spezifizierten Funktionaloperatoren (5.545) und (5.548) in die implementationsnahen Berechnungsanweisungen

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] = & \\ & - \mu_c \kappa_\tau \left\{ \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \left(\Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] - \kappa_N D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \right) \right. \\ & + (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \\ & \left. + \left[\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \mathbf{n}_r^{(m)T} \right] \Delta \Lambda_r^{(m)} \right\} \quad \forall r \in \mathcal{H}^{(m)} \quad (5.553) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] = & \mathbf{A}_{Ir} \left\{ \begin{array}{l} \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \\ \Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \end{array} \right\} \\ & - \mu_c \left\{ \Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \right\} \left(\Lambda_r^{(m)T} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] - \kappa_N D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \right) + \kappa_\tau \mathbf{A}_{Iir} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \\ & + \left[\mathbf{A}_{Ir} \boldsymbol{\tau}_r^{(m)T} - \mu_c \left[\left\{ \Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} \right\} \mathbf{n}_r^{(m)T} \right] \right] \Delta \Lambda_r^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{G}^{(m)}, \quad (5.554) \end{aligned}$$

mit den eingeführten Abkürzungen

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{Ir} = & \left[\Lambda_{Tr}^{(m)} \left\{ \frac{\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}}{\|\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\|} \right\}^T \right] \\ & + \left(\|\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\| - \mu_c (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \right) \mathbf{I}_2 \in \mathbb{R}^{2 \times 2}, \quad (5.555) \end{aligned}$$

$$\mathbf{A}_{Iir} = \left[\Lambda_{Tr}^{(m)} \left\{ \frac{\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}}{\|\Lambda_{Tr}^{(m)} + \kappa_\tau \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)}\|} \right\}^T \right] - \mu_c (\lambda_{Nr}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \mathbf{I}_2 \in \mathbb{R}^{2 \times 2}, \quad (5.556)$$

umschreiben.

Die formale Anwendung des Assemblierungsoperators \mathbf{A} auf Gl. (5.544) gestattet den folgenden globalen Ausdruck für sämtliche im Haftzustand verweilende Slave-Knoten

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{TH}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda} \tilde{\mathbf{c}}_{TH}^{(m)}[\Delta \Lambda] & \\ = & \mathbf{A} - \frac{1}{\mu_c \kappa_\tau} \left\{ D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{c}}_{Tr}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] \right\} \\ = & [\mathbf{T}_{uH} \quad \mathbf{T}_{\lambda H}]|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \left\{ \begin{array}{l} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \Lambda^{(m)} \end{array} \right\} = -\tilde{\mathbf{c}}_{TH}^{(m)}, \quad (5.557) \end{aligned}$$

mit dem globalen Spaltenvektor

$$\tilde{\mathbf{c}}_{\text{TH}}^{(m)} := \tilde{\mathbf{c}}_{\text{TH}}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{\Lambda}^{(m)}) = \mathbf{A} - \frac{1}{\mu_c K_\tau} \tilde{\mathbf{c}}_{\text{Tr}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}}}, \quad \hat{n}_{\text{uuH}} = 2 \times n_{\text{H}}^n, \quad (5.558)$$

als rechte Seite und den Matrixblöcken

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\text{uH}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{\text{uHN}} \quad \mathbf{T}_{\text{uHA}} \quad \mathbf{T}_{\text{uHI}} \quad \mathbf{T}_{\text{uHM}}]|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uu}}}, \\ \mathbf{T}_{\lambda\text{H}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{\lambda\text{HH}} \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{HG}} \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{HI}}]|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuS}}}, \\ \mathbf{T}_{\text{uHN}} &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{HG}} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{HI}} = \mathbf{0}, \end{aligned}$$

zu entwickeln. Bei der Analyse von Gl. (5.557) lässt sich erkennen, dass die Gateaux-Ableitungen $\text{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$, $\text{D}_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{g}}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$ und $\text{D}_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$, siehe Gl. (5.553), Beiträge zu den $\mathbf{U}_{\text{S}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}$ und $\mathbf{U}_{\text{M}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}}$ zugeordneten primalen Freiheitsgraden in den Anteilen $\mathbf{T}_{\text{uHA}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuA}}}$, $\mathbf{T}_{\text{uHI}}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuI}}}$ und $\mathbf{T}_{\text{uHM}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuM}}}$, der tangentialen Gesamtsteifigkeitsmatrix liefern. Insbesondere die beiden zuletzt aufgezählten Ableitungsgrößen, welche auf Basis der Mortar-Integrale $\hat{D}_{rs}(\mathbf{U}^{(m)})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{U}^{(m)})$ konstruiert werden, verursachen komplexe wechselseitige Kopplungen auf beiden Seiten des Interface. Der mit den diskreten Lagrange-Multiplikatoren assoziierte Funktionalmatrixblock $\mathbf{T}_{\lambda\text{H}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuS}}}$ wird gemäß der mit der Rutschhaftung einhergehenden Partitionierung der slave-seitigen Lösungsvektoren

$$\mathbf{U}_{\text{A}}^{(m)\text{T}} = \left\{ \mathbf{U}_{\text{H}}^{(m)\text{T}}, \mathbf{U}_{\text{G}}^{(m)\text{T}} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}}} \quad \text{und} \quad \mathbf{\Lambda}_{\text{A}}^{(m)\text{T}} = \left\{ \mathbf{\Lambda}_{\text{H}}^{(m)\text{T}}, \mathbf{\Lambda}_{\text{G}}^{(m)\text{T}} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuA}}}, \quad (5.559)$$

mit $\mathbf{U}_{\text{H}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuH}}}$, $\mathbf{U}_{\text{G}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuG}}}$, $\mathbf{\Lambda}_{\text{H}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuH}}}$, $\mathbf{\Lambda}_{\text{G}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuG}}}$, $n_{\text{uuH}} = 3 \times n_{\text{H}}^n$, $n_{\text{uuG}} = 3 \times n_{\text{G}}^n$, $n_{\text{uuA}} = n_{\text{uuH}} + n_{\text{uuG}}$, in die algebraischen Teilstrukturen $\mathbf{T}_{\lambda\text{HH}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuH}}}$, $\mathbf{T}_{\lambda\text{HG}} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuG}}}$ und $\mathbf{T}_{\lambda\text{HI}} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuI}}}$ zerlegt. Da sich die auf die Spannungsvektoren bezogenen Kopplungen für die tangentiale Interfacebedingung $\tilde{\mathbf{c}}_{\text{Tr}}^{(m)}$ eines haftenden Kontaktknotens $r \in \mathcal{H}^{(m)}$ auf Freiheitsgrade, die $\mathbf{\Lambda}_r^{(m)} \in \mathbb{R}^3$, $r \in \mathcal{H}^{(m)}$, selbst zugeordnet sind, beschränken, fallen sämtliche nicht mit dem Knotensatz $\mathcal{H}^{(m)}$ assoziierte Einträge in $\mathbf{T}_{\lambda\text{H}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuS}}}$ weg. Der verbleibende Funktionaloperator $\mathbf{T}_{\lambda\text{HH}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuH}}}$ besitzt kongruent zu den Gl. (5.532) und (5.533) die knotenspezifische Blockstruktur:

$$\mathbf{T}_{\lambda\text{HH}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} = \boldsymbol{\tau}_{\text{H}}|_{\mathbf{U}^{(m)}}, \quad \boldsymbol{\tau}_{\text{H}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{T1}}^{(m)} \mathbf{n}_1^{(m)\text{T}} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{v}}_{\text{T2}}^{(m)} \mathbf{n}_2^{(m)\text{T}} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \tilde{\mathbf{v}}_{\text{T}n_{\text{H}}^n}^{(m)} \mathbf{n}_{n_{\text{H}}^n}^{(m)\text{T}} \end{bmatrix} \quad (5.560)$$

Infolge der Beschreibung des Normalenvektors $\mathbf{n}_r^{(m)} := \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^3$, $r \in \mathcal{S}$, und der tangentialen Relativgeschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}^{(m)} := \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^2$, $r \in \mathcal{S}$, als kinematische Funktionen in Abhängigkeit von $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ erfolgt die Auswertung von $\mathbf{T}_{\lambda\text{HH}}|_{\mathbf{U}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuH}} \times n_{\text{uuH}}}$ lediglich an der Stelle $\mathbf{U}^{(m)}$.

Die globale algebraische Formulierung für die linearisierten Schlupfbedingungen wird in analoger Art und Weise konzipiert. Es resultiert die folgende Gleichungsstruktur

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{C}}_{\text{TG}}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda} \tilde{\mathbf{C}}_{\text{TG}}^{(m)}[\Delta \Lambda] \\ = \bigwedge_{r \in \mathcal{G}^{(m)}} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{C}}_{\text{Tr}}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda_r} \tilde{\mathbf{C}}_{\text{Tr}}^{(m)}[\Delta \Lambda_r] \\ = [\mathbf{T}_{\text{uG}} \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{G}}] \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \left\{ \begin{array}{c} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \Lambda^{(m)} \end{array} \right\} = -\tilde{\mathbf{C}}_{\text{TG}}^{(m)}, \end{aligned} \quad (5.561)$$

mit dem Residuumvektor

$$\tilde{\mathbf{C}}_{\text{TG}}^{(m)} := \tilde{\mathbf{C}}_{\text{TG}}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}) = \bigwedge_{r \in \mathcal{G}^{(m)}} \tilde{\mathbf{C}}_{\text{Tr}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}}}, \quad \hat{n}_{\text{uuG}} = 2 \times n_{\text{G}}^n, \quad (5.562)$$

und den Untermatrizen der tangentialen Steifigkeitsmatrix

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\text{uG}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{\text{uGN}} \quad \mathbf{T}_{\text{uGA}} \quad \mathbf{T}_{\text{uGI}} \quad \mathbf{T}_{\text{uGM}}] \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uu}}}, \\ \mathbf{T}_{\lambda\text{G}} \big|_{\mathbf{U}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{\lambda\text{GH}} \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{GG}} \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{GI}}] \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuS}}}, \\ \mathbf{T}_{\text{uGN}} &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{GH}} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{T}_{\lambda\text{GI}} = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Neben $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$, $D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{g}}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$ und $D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$ sind beim Aufstellen von $\mathbf{T}_{\text{uG}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuS}}}$ bzw. dessen Untermatrizen $\mathbf{T}_{\text{uGA}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuA}}}$, $\mathbf{T}_{\text{uGI}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuI}}}$ und $\mathbf{T}_{\text{uGM}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuM}}}$ die Gateaux-Ableitungen der Tangentenvektoren, d. h. $D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi_r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$ und $D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta_r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$, beteiligt. Damit wird erstmals das volle Repertoire der in Abschnitt C.4 im Detail erörterten Berechnungsvorschriften zur Bestimmung dieser verschiebungsbezogenen Richtungsableitungen ausgeschöpft. Des Weiteren implizieren die zahlreichen multiplikativen Verknüpfungen der aufgezählten partiellen Ableitungen nach $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ mit $\Lambda_r^{(m)} \in \mathbb{R}^3$ bzw. $\Lambda_{\text{Tr}}^{(m)} \in \mathbb{R}^2$ die Auswertung der algebraischen Elemente $\mathbf{T}_{\text{uGA}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuA}}}$, $\mathbf{T}_{\text{uGI}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuI}}}$, und $\mathbf{T}_{\text{uGM}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuM}}}$ an der Stelle $\tilde{\mathbf{y}}^{(m)\text{T}} := \{\mathbf{U}^{(m)\text{T}}, \Lambda^{(m)\text{T}}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$. Die Aussagen für die mit den diskreten Lagrange-Multiplikatoren assoziierte Funktionalmatrix $\mathbf{T}_{\lambda\text{G}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuS}}}$ werden von dem vorhergehend diskutierten Fall des Haftens auf den Lösungszweig des Gleitens konform übertragen. Der einzige nicht zu Null kollabierende, aus $\mathbf{T}_{\lambda\text{G}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuS}}}$ extrahierte globale Ableitungsoperator $\mathbf{T}_{\lambda\text{GG}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{\text{uuG}} \times n_{\text{uuG}}}$ besitzt dann den knotenspezifischen Aufbau

$$\mathbf{T}_{\lambda\text{GG}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} = \boldsymbol{\tau}_{\text{G}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}}, \quad \boldsymbol{\tau}_{\text{G}} \big|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\text{III1}} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{\text{III2}} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{A}_{\text{III}n_{\text{G}}^n} \end{bmatrix}, \quad (5.563)$$

mit der eingeführten Abkürzung

$$\mathbf{A}_{\text{III}r} := \mathbf{A}_{\text{Ir}} \boldsymbol{\tau}_r^{(m)\text{T}} - \mu_c \left[\left\{ \Lambda_{\text{Tr}}^{(m)} + \kappa_{\tau} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}^{(m)} \right\} \mathbf{n}_r^{(m)\text{T}} \right] \in \mathbb{R}^{2 \times 3}. \quad (5.564)$$

Da in Definition (5.564), neben $\tilde{g}_r^{(m)} := \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})$ und $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}^{(m)} := \tilde{\mathbf{v}}_{Tr}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^2$, von $\Lambda_r^{(m)} \in \mathbb{R}^3$ direkt abgeleitete Größen involviert sind, erfolgt formal die Auswertung von $\mathbf{T}_{\lambda GG}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}}$ ebenfalls an der Stelle $\tilde{\mathbf{y}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{xu}}$.

Um für das reibungslose und reibungsbehaftete Kontaktszenario eine einheitliche algebraische Struktur zu entwickeln, werden die linearisierten Gleichungsböcke (5.557) und (5.561), die zusammen eine inkrementelle Formulierung der tangentialen Kopplungsbedingungen an allen aktiven Kontaktknoten abstecken, miteinander verknüpft. Unter Berücksichtigung der Definition

$$\tilde{\mathbf{C}}_{TA}^{(m)T} := \tilde{\mathbf{C}}_{TA}^T(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)}) = \left\{ \tilde{\mathbf{C}}_{TH}^{(m)T}, \tilde{\mathbf{C}}_{TG}^{(m)T} \right\} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA}}, \quad (5.565)$$

$\hat{n}_{uuA} = n_{uuA} - n_A^n = \hat{n}_{uuH} + \hat{n}_{uuG}$, geht die konsistente Linearisierungsvorschrift

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{C}}_{TA}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)})[\Delta \mathbf{U}] + D_{\Lambda} \tilde{\mathbf{C}}_{TA}(\mathbf{U}^{(m)}, \Lambda^{(m)})[\Delta \Lambda] \\ = [\mathbf{T}_{uA} \quad \mathbf{T}_{\lambda A}]|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \left\{ \begin{array}{c} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \Lambda^{(m)} \end{array} \right\} = -\tilde{\mathbf{C}}_{TA}^{(m)}, \end{aligned} \quad (5.566)$$

mit den Funktionalmatrixblöcken

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{uA}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{uAN} \quad \mathbf{T}_{uAA} \quad \mathbf{T}_{uAI} \quad \mathbf{T}_{uAM}]|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uu}}, \\ \mathbf{T}_{uAN} &= \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{uGN} \\ \mathbf{T}_{uHN} \end{bmatrix} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuN}}, \quad \mathbf{T}_{uAA}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{uGA} \\ \mathbf{T}_{uHA} \end{bmatrix}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuA}}, \\ \mathbf{T}_{uAI}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &= \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{uGI} \\ \mathbf{T}_{uHI} \end{bmatrix}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuI}}, \quad \mathbf{T}_{uAM}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{uGM} \\ \mathbf{T}_{uHM} \end{bmatrix}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuM}}, \\ \mathbf{T}_{\lambda A}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &= [\mathbf{T}_{\lambda AA} \quad \mathbf{T}_{\lambda AI}]|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuS}}, \\ \mathbf{T}_{\lambda AA}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} &= \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{\lambda HH} & \mathbf{T}_{\lambda HG} \\ \mathbf{T}_{\lambda GH} & \mathbf{T}_{\lambda GG} \end{bmatrix}|_{\tilde{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuA}}, \quad \mathbf{T}_{\lambda AI} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{\lambda HI} \\ \mathbf{T}_{\lambda GI} \end{bmatrix} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuI}}, \end{aligned}$$

hervor.

Wie außerdem bereits im Rahmen eines reibungslosen Kontaktszenarios im vorherigen Paragraphen eingehend veranschaulicht, ist es zweckmäßig, die linearisierten tangentialen Spannungsrandbedingungen (5.550) an den inaktiven Slave-Knoten $r \in \mathcal{I}^{(m)}$ und die aus der normalen Komplementaritätsfunktion (5.443) resultierende Aussage (5.523) für $r \in \mathcal{I}^{(m)}$ zusammenzufassen. Hieraus folgt die triviale globale Linearisierungsvorschrift

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{uuI} \times n_{uu}} & \mathbf{0}_{n_{uuI} \times n_{uuA}} & \mathbf{I}_{n_{uuI}} \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{c} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \Lambda^{(m)} \end{array} \right\} = -\tilde{\mathbf{C}}_{TI}^{(m)}, \quad (5.567)$$

mit $\tilde{\mathbf{C}}_{TI}^{(m)} := \Lambda_I^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuI}}$. Weiterhin induziert die Fusion der Aussagen (5.523) und (5.529) auch eine Änderung der Reihenfolge in dem eingangs zu Abschnitt 5.7.1 postulierten globalen Residuumsvektor (5.495). Analog zu dem reibungslosen Fall wird für die weiteren Ausführungen der Ausdruck (5.495) durch

$$\mathbf{G}^T(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \left\{ \mathbf{G}_u^{(m)T}, \tilde{\mathbf{g}}_A^{(m)T}, \tilde{\mathbf{C}}_{TA}^{(m)T}, \tilde{\mathbf{C}}_{TI}^{(m)T} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}} \quad (5.568)$$

substituiert.

5.7.1.4 Matrixformulierung des linearisierten Gleichungssystems

Zusammenfassend ergibt sich auf Grundlage der in den vorangegangenen Abschnitten 5.7.1.1 bis 5.7.1.3 vorgestellten globalen linearisierten Beziehungen das folgende in jedem Iterationsschritt (m) des halbglaten Mehrebenen-Newton-Verfahrens zu lösende lineare Gleichungssystem

$$\underbrace{\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}}}_{\in \mathbb{R}^{n_{xu} \times n_{xu}}} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{NN} & \mathbf{K}_{NA} & \mathbf{K}_{NI} & \mathbf{K}_{NM} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{AN} & \mathbf{K}_{AA} & \mathbf{K}_{AI} & \mathbf{K}_{AM} & \hat{\mathbf{D}}_{AA}^T & \hat{\mathbf{D}}_{IA}^T \\ \mathbf{K}_{IN} & \mathbf{K}_{IA} & \mathbf{K}_{II} & \mathbf{K}_{IM} & \hat{\mathbf{D}}_{AI}^T & \hat{\mathbf{D}}_{II}^T \\ \mathbf{K}_{MN} & \mathbf{K}_{MA} & \mathbf{K}_{MI} & \mathbf{K}_{MM} & -\hat{\mathbf{M}}_{AI}^T & -\hat{\mathbf{M}}_{II}^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{N}_{uAA} & \mathbf{N}_{uAI} & \mathbf{N}_{uAM} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}_{uAA} & \mathbf{T}_{uAI} & \mathbf{T}_{uAM} & \mathbf{T}_{\lambda AA} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_{n_{uuI}} \end{bmatrix} \mathbf{y}^{(m)} = - \underbrace{\mathbf{G}^{(m)}}_{\in \mathbb{R}^{n_{xu}}} \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{uN}^{(m)} \\ \mathbf{G}_{uA}^{(m)} \\ \mathbf{G}_{uI}^{(m)} \\ \mathbf{G}_{uM}^{(m)} \\ \tilde{\mathbf{g}}_A \\ \tilde{\mathbf{C}}_{TA}^{(m)} \\ \tilde{\mathbf{C}}_{TI}^{(m)} \end{bmatrix}, \quad (5.569)$$

mit $\mathbf{y}^{(m)T} := \{\mathbf{U}^{(m)T}, \mathbf{\Lambda}^{(m)T}, \mathbf{Q}^{(m+1)T}\} \in \mathbb{R}^{n_{xu}+n_Q}$. Die Anordnung der inkrementellen Systemgleichungen in Gl. (5.569) erfolgt in der im Rahmen des konsistenten Linearisierungsprozesses beschriebenen Abfolge, sodass für weitere Erläuterungen zu den einzelnen, die tangentielle Gesamtsteifigkeitsmatrix bildenden Funktionaloperatoren und den zugehörigen Partitionierungen der rechten Seite auf die vorherigen Abschnitte 5.7.1.1 bis 5.7.1.3 referiert wird. Das linearisierte System (5.569) ist aufgrund der gewählten, vereinheitlichenden Nomenklatur sowohl für das reibungslose als auch das reibungsbehaftete Kontaktproblem gültig. Für eine speicherplatzsparende Implementierung empfiehlt es sich allerdings die spezifischen Eigenschaften der Funktionaloperatoren $\mathbf{T}_{uAM} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuM}}$ und $\mathbf{T}_{\lambda A} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuS}}$ in Bezug auf das jeweilige Kontaktszenario zu beachten, siehe Abschnitt 5.7.1.2 für weitere Details.

Obwohl sich formal die tangentielle Gesamtsteifigkeitsmatrix $\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{xu} \times n_{xu}}$ durch sieben Unterteilungen in der Zeilendimension und nur sechs Partitionierungen in der Spaltenrichtung auszeichnet, repräsentiert $\mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{xu} \times n_{xu}}$ dennoch einen globalen quadratischen, blockstrukturierten Tangentenoperator. Diese erst auf den zweiten Blick hervorstechende Eigenart von Gl. (5.569) resultiert aus der Tatsache, dass die linearisierten Normal- und Tangentialkontaktbedingungen für den aktiven Knotensatz $\mathcal{A}^{(m)}$ separat niedergeschrieben sind.

Weiterhin ist die charakteristische, mit einer Lagrange-Multiplikator-Formulierung einhergehende Sattelpunktstruktur, die sich als Resultat der Ableitung der aktiven Normalkontaktbedingungen nach $\mathbf{\Lambda}_A^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuA}}$ in Gestalt eines zu Null „kollabierenden“ Funktionalmatrixblocks (Nullmatrixblock, siehe Eintrag in fünfter Zeile und fünfter Spalte von \mathbf{K}) manifestiert, in Gl. (5.569) deutlich erkennbar. Typischerweise wirkt sich solch ein zu Null reduzierender Diagonalblock negativ auf das Konvergenzverhalten von iterativen Gleichungslösern aus, siehe [Popp, 2012].

Anmerkung 6 Anstatt das lineare Gleichungssystem (5.569) in Abhängigkeit der inkrementellen Größe $\Delta \mathbf{\Lambda}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ auszudrücken, findet in zahlreichen Arbeiten, wie z. B.

in [Hartmann, 2007; Gitterle, 2012; Popp, 2012; Cichosz, 2012], eine gleichwertige Formulierung von Gl. (5.569) auf Grundlage von $\Lambda^{(m+1)} = \Lambda^{(m)} + \Delta\Lambda^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ Anwendung. Als Argumentation für solch einen Ansatz wird die Gelegenheit zur Kombinierbarkeit von linearisierten Termen der verallgemeinerten Form

$$(\cdot) * \Delta\Lambda^{(m)} = -(\cdot) * \Lambda^{(m)} \quad \Rightarrow \quad (\cdot) * \Lambda^{(m+1)} = \mathbf{0},$$

wobei der Operator $*$ eine entsprechende multiplikative Verknüpfung zwischen den Operanden kennzeichnet, angeführt. Angesichts der zumindest bei reibungsfreien Kontaktproblemen durchgehend vorliegenden Linearität von den diskreten Lagrange-Multiplikatoren in dem zu lösenden nichtlinearen Gleichungssystem (5.488) kann so die rechte Seite in Gl. (5.569) vollständig von $\Lambda^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ befreit werden. Außer Acht wird jedoch dabei zumeist gelassen, dass beispielsweise die Funktionalmatrizen $\mathbf{K}_{uu}^{co}|_{\bar{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}}$, siehe Gl. (5.502), und $\mathbf{T}_{uA}|_{\bar{\mathbf{y}}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uu}}$, vgl. Gl. (5.534) und (5.534), weiterhin eine Auswertung an der Stelle $\Lambda^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ voraussetzen. Ein gänzlicher Verzicht auf den globalen Spaltenvektor $\Lambda^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ ist damit ausgeschlossen. Aus Sicht des Autors der vorliegenden Monographie ergeben sich hierdurch keinerlei Vorteile hinsichtlich Effizienz oder Speicherbedarf gegenüber der inkrementellen Beschreibung (5.569) mit $\Delta\Lambda^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$. In der vorliegenden Arbeit stellt eine Formulierung des linearen Gleichungssystems in Gestalt von Gl. (5.569) daher die bevorzugte Wahl dar.

5.7.2 Algebraische Repräsentation des linearisierten Gleichungssystems bzgl. einer Standard-Lagrange-Multiplikator- und Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation

Aufgrund der exakten Umsetzung der Kontaktbedingungen mit Hilfe der Lagrange-Multiplikator-Methode enthält das innerhalb des iterativen Mehrebenen-Newton-Verfahrens zu lösende lineare Gleichungssystem (5.569) neben den nicht durch Dirichlet-Randbedingungen fixierten Knotenverschiebungen $\mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, den primalen Variablen, bzw. präziser dessen Korrekturinkrement $\Delta\mathbf{U}^{(m)} = \mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ auch zusätzliche Interfacegrößen in Form der diskreten Lagrange-Multiplikatorzuwächse $\Delta\Lambda^{(m)} = \Lambda^{(m+1)} - \Lambda^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ (duale Variablen) als Unbekannte. Der offensichtlich auf der Hand liegende Vorteil dieser Kontaktbehandlung wird also im Vergleich zu einer rein verschiebungsbezogenen Formulierung, wie z. B. einer Penalty-Methode, durch den Nachteil einer vergrößerten Systemdimension in Bezug auf Gl. (5.569) erkaufte. Das anzustrebende Ziel jeder effizienten Kontaktformulierung mit zusätzlichen Interfacevariablen sollte es daher sein, diese Größen aus dem linearen Gleichungssystem herauszukondensieren und ausschließlich für die Primärgrößen zu lösen. Solche Ansätze sind Gegenstand der in den folgenden Paragraphen geführten Diskussionen.

Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation Wie bereits im Vorfeld zu den Ausführungen der mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie in Kombination mit einer Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation, siehe Abschnitt 5.5.4.2, angemerkt, ermöglicht solch eine Formulierung die vollständige Eliminierung aller diskreten Lagrange-

Multiplikatorfreiheitsgrade aus dem linearen Gleichungssystem (5.569). Dabei werden zunächst die trivialen Kontaktbedingungen für den inaktiven Knotensatz $\mathcal{I}^{(m)}$ nach $\Delta \mathbf{\Lambda}_I^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuI}}$ aufgelöst. Es resultiert die Identität

$$\Delta \mathbf{\Lambda}_I^{(m)} = -\mathbf{\Lambda}_I^{(m)} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{\Lambda}_I^{(m+1)} = \mathbf{0}. \quad (5.570)$$

Auf Basis des Umformungsschritts (5.570) lassen sich so die fünfte Zeile sowie die fünfte Spalte aus dem originalen diskreten Sattelpunktsystem (5.569) entfernen. Der restliche Teil der statischen Kondensationsstrategie für die dualen Variablen ist auf die besondere algebraische Struktur der globalen Mortar-Matrix $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}}$ bzw. dessen Inverse $\hat{\mathbf{D}}^{-1} \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}}$ zurückzuführen. Infolge der auf Basis der Biorthogonalitätsbedingung konstruierten dualen Formfunktionen, siehe Abschnitt 5.5.4.2, reduziert sich $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}}$ zu einer Diagonalmatrix, d. h. die globale Kopplungsmatrix nimmt unter Berücksichtigung der Partitionierung (5.513)₁ die Gestalt

$$\hat{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{D}}_{AA} & \mathbf{0}_{n_{uuA} \times n_{uuI}} \\ \mathbf{0}_{n_{uuI} \times n_{uuA}} & \hat{\mathbf{D}}_{II} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}} \quad (5.571)$$

an. Nach Integration dieser Vereinfachung in das linearisierte Gleichungssystem (5.569) kann das aktive diskrete Lagrange-Multiplikatorinkrement $\Delta \mathbf{\Lambda}_{TA}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuA}}$ durch die Beziehung

$$\Delta \mathbf{\Lambda}_A^{(m)} = -\hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \hat{\mathbf{G}}_A, \quad \text{mit} \quad (5.572)$$

$$\hat{\mathbf{G}}_A = \mathbf{G}_{uA}^{(m)} + \mathbf{K}_{AN}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{U}_N^{(m)} + \mathbf{K}_{AA}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{U}_A^{(m)} + \mathbf{K}_{AI}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{U}_I^{(m)} + \mathbf{K}_{AM}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{U}_M^{(m)}, \quad (5.573)$$

ausgedrückt werden. Die triviale Inversion der Diagonalmatrix $\hat{\mathbf{D}}_{AA}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuA}}$ bereitet keine Schwierigkeiten, sodass der Berechnungsschritt (5.572) mit geringem numerischen Aufwand durchführbar ist. Die Substitution von Gl. (5.572) in Gl. (5.569) liefert schließlich das folgende modifizierte Gleichungssystem in dem nur noch die Verschiebungsinkremente $\Delta \mathbf{U}^{(m)T} = \left\{ \Delta \mathbf{U}_N^{(m)T}, \Delta \mathbf{U}_A^{(m)T}, \Delta \mathbf{U}_I^{(m)T}, \Delta \mathbf{U}_M^{(m)T} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ als Unbekannte auftreten:

$$\check{\mathbf{K}}|_{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{U}^{(m)} = -\check{\mathbf{G}}^{(m)}, \quad (5.574)$$

mit einer modifizierten tangentialen Gesamtsteifigkeitsmatrix

$$\check{\mathbf{K}}|_{\mathbf{y}^{(m)}} = \left[\begin{array}{cccc} \mathbf{K}_{NN} & \mathbf{K}_{NA} & \mathbf{K}_{NI} & \mathbf{K}_{NM} \\ \mathbf{K}_{IN} & \mathbf{K}_{IA} & \mathbf{K}_{II} & \mathbf{K}_{IM} \\ \mathbf{K}_{MN} + \check{\mathbf{K}}_{MN} & \mathbf{K}_{MA} + \check{\mathbf{K}}_{MA} & \mathbf{K}_{MI} + \check{\mathbf{K}}_{MI} & \mathbf{K}_{MM} + \check{\mathbf{K}}_{MM} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N}_{uAA} & \mathbf{N}_{uAI} & \mathbf{N}_{uAM} \\ \check{\mathbf{T}}_{uAN} & \check{\mathbf{T}}_{uAA} - \mathbf{T}_{uAA} & \check{\mathbf{T}}_{uAI} - \mathbf{T}_{uAI} & \check{\mathbf{T}}_{uAM} - \mathbf{T}_{uAM} \end{array} \right] \bigg|_{\mathbf{y}^{(m)}} \in \mathbb{R}^{n_{uu} \times n_{uu}},$$

einer reorganisierten rechten Seite

$$\check{\mathbf{G}}^{(m)} = \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{G}_{uN}^{(m)} \\ \mathbf{G}_{uI}^{(m)} - \hat{\mathbf{D}}_{II} \boldsymbol{\Lambda}_I^{(m)} \\ \mathbf{G}_{uM}^{(m)} + \hat{\mathbf{M}}_I^T \boldsymbol{\Lambda}_I^{(m)} + \hat{\mathbf{M}}_A^T \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{G}_{uA}^{(m)} \\ \mathbf{g}_A \\ \mathbf{T}_{\lambda AA} \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{G}_{uA}^{(m)} - \tilde{\mathbf{C}}_{TA}^{(m)} \end{array} \right\} \in \mathbb{R}^{n_{uu}},$$

sowie den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{K}}_{MN} &= \hat{\mathbf{M}}_A^T \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AN} \in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuN}}, & \check{\mathbf{K}}_{MA} &= \hat{\mathbf{M}}_A^T \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AA} \in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuA}}, \\ \check{\mathbf{K}}_{MI} &= \hat{\mathbf{M}}_A^T \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AI} \in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuI}}, & \check{\mathbf{K}}_{MM} &= \hat{\mathbf{M}}_A^T \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AM} \in \mathbb{R}^{n_{uuM} \times n_{uuM}}, \\ \check{\mathbf{T}}_{uAN} &= \mathbf{T}_{\lambda AA} \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AN} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuN}}, & \check{\mathbf{T}}_{uAA} &= \mathbf{T}_{\lambda AA} \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AA} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuA}}, \\ \check{\mathbf{T}}_{uAI} &= \mathbf{T}_{\lambda AA} \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AI} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuI}}, & \check{\mathbf{T}}_{uAM} &= \mathbf{T}_{\lambda AA} \hat{\mathbf{D}}_{AA}^{-1} \mathbf{K}_{AM} \in \mathbb{R}^{\hat{n}_{uuA} \times n_{uuM}} \end{aligned}$$

Das nun zu lösende reduzierte System (5.574) zeichnet sich durch die konstante Dimension n_{uu} aus. Die inkrementellen Änderungen der diskreten Lagrange-Multiplikatoren $\Delta \boldsymbol{\Lambda}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuS}}$ werden in einer Nachlaufrechnung des aktuellen Iterationsschritts (m) auf Basis der Beziehungen (5.570)₁ und (5.572) determiniert. Gleichzeitig gelingt es im Rahmen der erörterten statischen Kondensationsstrategie die unerwünschte Sattelpunktstruktur, also den mit Nulleinträgen versehenen Diagonalblock, von Gl. (5.569) vollständig zu entfernen.

Anmerkung 7 Obwohl nicht im Detail in der vorliegenden Arbeit erläutert, sei angemerkt, dass die statischen Kondensationsoperationen vollständig auf der lokalen Ebene eines Kontakt-Segments umsetzbar sind. Eine globale Realisierung, wie hier dargestellt, ist aufgrund des hohen numerischen Ressourceneinsatzes nicht zu empfehlen.

Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation Eine kongruente leistungsfähige statische Kondensationsstrategie wie im vorherigen Paragraphen ist im Rahmen der mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie in Kombination mit einer Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation, siehe Abschnitt 5.5.4.1, nicht applizierbar. Verständlicherweise gelingt es durch Ausnutzen der Identität $\Delta \boldsymbol{\Lambda}_I^{(m)} = -\boldsymbol{\Lambda}_I^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuI}}$, siehe Gl. (5.570), die banalen Kontaktbedingungen für den inaktiven Knotensatz $\mathcal{I}^{(m)}$ sowie die mit $\Delta \boldsymbol{\Lambda}_I^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuI}}$ assoziierte Spalte aus dem linearen Gleichungssystem (5.569) zu entfernen. Die Verwendung von Standardansatzfunktionen zur Interpolation schränkt jedoch weitere algebraische Vereinfachungen erheblich ein. Die globale Kopplungsmatrix

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}^{(m)}) = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{D}}_{AA}(\mathbf{U}^{(m)}) & \hat{\mathbf{D}}_{AI}(\mathbf{U}^{(m)}) \\ \hat{\mathbf{D}}_{IA}(\mathbf{U}^{(m)}) & \hat{\mathbf{D}}_{II}(\mathbf{U}^{(m)}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}}$$

weist nunmehr nicht länger eine Diagonalstruktur, sondern einen zu einer konsistenten Massenmatrix konformen Aufbau, auf. Diesem algorithmischen Umstand geschuldet, ist die Invertierung von $\hat{\mathbf{D}}_{AA}(\mathbf{U}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n_{uuA} \times n_{uuA}}$ nur mit einem sehr hohen numerischen Ressourceneinsatz durchführbar. Eine kongruente statische Kondensationsoperation analog

zu Gl. (5.572) zur Eliminierung der diskreten aktiven Lagrange-Multiplikatorinkremente $\Delta \Lambda_A^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuA}}$ ist aus diesem Grund für moderate Systemgrößen hinsichtlich numerischer Effizienz und Speicherbedarf in keinem vertretbaren Aufwand realisierbar. Findet lediglich der statische Kondensationsschritt für $\Delta \Lambda_I^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{uuI}}$ bei der Reduzierung der Anzahl von Unbekannten in Gl. (5.569) Anwendung, verändert sich fortlaufend im Rahmen einer nicht auskonvergierten Aktiven-Mengen-Strategie in jedem Iterationsschritt (m) die Systemdimension des verbleibenden linearen Gleichungssystems. Ein solches Szenario impliziert unvorteilhafte Rahmenbedingungen an den linearen Gleichungslöser, sodass hiervon abgeraten wird. Im Kontext einer Kontaktdiskretisierung mit Standard-Lagrange-Multiplikatoren wird infolgedessen in der vorliegenden Arbeit das vollständige Gleichungssystem (5.569) gelöst.

Anmerkung 8 *Einen speziellen Reduktionsansatz auf Basis der sogenannten diskreten Nullraum-Methode zur Behandlung von allgemeinen Sattelpunktsystemen, die aus einem unilateralen Kontaktproblem ohne Reibung hervorgehen, schlagen Hesch und Betsch [2009] vor. Konform zu der im vorherigen Paragraphen präsentierten statischen Kondensationsprozedur mit Dualen-Lagrange-Multiplikator gelingt es durch Anwendung der diskreten Nullraum-Methode sämtliche Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgrade in dem linearen Gleichungssystem zu eliminieren. Ausgangspunkt bildet eine Koordinatentransformation, die in Bezug auf die formulierten Normalkontaktbedingungen des aktiven Knotensatzes eine spezifische Aufteilung von unabhängigen und abhängigen Verschiebungsvariablen vornimmt. Auf Grundlage dessen wird ein sogenannter Nullraum-Operator definiert, welcher eine äquivalente Formulierung des verallgemeinerten Sattelpunktsystems ohne diskrete Lagrange-Multiplikatoren erlaubt und so die Systemdimension des zu lösenden linearen Gleichungssystems auf die Anzahl unbekannter Verschiebungen reduziert. Allerdings geht der spezielle Reduktionsansatz auch mit einigen Nachteilen einher. So sind zum Lösen des modifizierten Strukturgleichungssystems, identisch zur unvorteilhaften statischen Kondensationsstrategie mit Standardansatzfunktionen, im Allgemeinen zwei Invertierungen von dicht besetzten Matrizen erforderlich, wodurch die Berechnungseffizienz geschmälert wird. Nach Einschätzung des Autors der vorliegenden Arbeit erstreckt sich der Einsatzbereich der in [Hesch und Betsch, 2009] vorgeschlagenen Nullraum-Methode auf reibungsfreie Kontaktprobleme, die lediglich auf ein skalarwertiges Lagrange-Multiplikatorfeld zur Erzwingung der Normalkontaktbedingungen zurückgreifen. Werden tangential Kontaktbedingungen, wie im Abschnitt 5.7.1.2, berücksichtigt, ist die Lösungsmethodik nicht mehr numerisch effizient anwendbar. Zusammenfassend lässt sich resümieren, dass der Reduktionsansatz auf Basis der diskreten Nullraum-Methode keine Alternative zur dualen Mortar-Methode darstellt.*

5.7.3 Kompakte Darstellung des iterativen Lösungsalgorithmus

Abschließend ist der gesamte iterative Lösungsalgorithmus zur Behandlung des nichtlinearen effektiven Strukturgleichungssystems (5.488), dem eine räumliche Kontaktdiskretisierung auf Basis der Mortar-Methode mit einer Standard-Lagrange-Multiplikator- oder Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation zugrunde liegt, in Tab 5.11 und Abb. 5.28 noch einmal kompakt zusammengefasst. Die Auflösung der Geometrie-

Tabelle 5.11: Ablaufschema für das halbglatte Multilevel-Newton-Verfahren (MLNA) zur Lösung des nichtlinear blockstrukturierten Gleichungssystems (5.488)

Gegeben: Startvektorabschätzung für $\mathbf{U}^{(0)}$, $\mathbf{\Lambda}^{(0)}$ und $\mathbf{Q}^{(0)}$ Initialisierung der Knotensätze $\mathcal{A}^{(m)} = \emptyset$, $\mathcal{H}^{(m)} = \emptyset$, $\mathcal{G}^{(m)} = \emptyset$, $\mathcal{I}^{(m)} = \emptyset$	
Wiederhole $m = 0, \dots$	
<i>Lokale Ebene (Quadratur- bzw. Gauß-Punktebene)</i> Gegeben: $\mathbf{U}^{(m)}$, $\mathbf{Q}^{(m+1)} = \mathbf{Q}^{(m)}$ Löse nichtlineares Gleichungssystem für lokalen Integrationsschritt $\mathbf{L}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \mathbf{Q}^{(m+1)}$ Konsistente Linearisierung mit $\mathbf{W}^{(m)\text{T}} := \tilde{\mathbf{y}}^{(m)\text{T}} = \{\mathbf{U}^{(m)\text{T}}, \mathbf{\Lambda}^{(m)\text{T}}\}$ und aktual. $\hat{\mathbf{y}}^{(m)\text{T}} := \{\mathbf{U}^{(m)\text{T}}, \mathbf{Q}^{(m+1)\text{T}}\}$, $\mathbf{y}^{(m)\text{T}} := \{\mathbf{W}^{(m)\text{T}}, \mathbf{Q}^{(m+1)\text{T}}\}$ $\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\text{d} \hat{\mathbf{Q}}}{\text{d} \mathbf{U}} \right] \Big _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} = - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} \Big _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \quad \rightsquigarrow \frac{\text{d} \hat{\mathbf{Q}}}{\text{d} \mathbf{U}} \Big _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}}$	
<i>Globale Ebene</i> Löse globales lineares Gleichungssystem $\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{W}} + \left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\text{d} \hat{\mathbf{Q}}}{\text{d} \mathbf{U}} \quad \mathbf{0}_{n_{xu} \times n_{uuS}} \right] \right] \Big _{\mathbf{y}^{(m)}} \Delta \mathbf{W}^{(m)} = -\mathbf{G}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}), \quad \rightsquigarrow \Delta \mathbf{W}^{(m)}$ mit dem Schema 5.28 für $\mathbf{G}^{(m)\text{T}} := \mathbf{G}^{\text{T}}(\mathbf{W}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \left\{ \mathbf{G}_{\text{u}}^{(m)\text{T}}, \tilde{\mathbf{g}}_{\text{A}}^{(m)\text{T}}, \tilde{\mathbf{c}}_{\text{TA}}^{(m)\text{T}}, \tilde{\mathbf{c}}_{\text{TI}}^{(m)\text{T}} \right\}$	
Bis Konvergenzkriterien für $\mathbf{G}^{(m)}$ und $\Delta \mathbf{W}^{(m)}$ sowie $\mathcal{A}^{(m)} = \mathcal{A}^{(m-1)}$, $\mathcal{I}^{(m)} = \mathcal{I}^{(m-1)}$, $\mathcal{H}^{(m)} = \mathcal{H}^{(m-1)}$, $\mathcal{G}^{(m)} = \mathcal{G}^{(m-1)}$ erfüllt sind.	

Berechnung Residuums- und Steifigkeitsanteil: $\tilde{\mathbf{G}}_{\mathbf{u}}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}), \tilde{\mathbf{K}}_{\mathbf{uu}} _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} := \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{G}}_{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{G}}_{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\mathbf{U}} \right] \Big _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}}$	
Mortar-basierte Kontaktformulierung	
Globale Kontaktsuche	
Berechnung Orthonormalbasis in $r \in \mathcal{S}$, $\mathbf{n}_r^{(m)} := \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)})$, $\boldsymbol{\tau}_{\xi_r}^{(m)} := \boldsymbol{\tau}_{\xi_r}(\mathbf{U}^{(m)})$, $\boldsymbol{\tau}_{\eta_r}^{(m)} := \boldsymbol{\tau}_{\eta_r}(\mathbf{U}^{(m)})$, sowie deren Richtungsableitungen $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$, $D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\xi_r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}]$, $D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_{\eta_r}^{(m)}[\Delta \mathbf{U}] \quad \forall r \in \mathcal{S}$	
Segmentierung des Kontakt-Interface	
Berechnung: $\mathbf{f}_c(\mathbf{U}^{(m)}, \boldsymbol{\Lambda}^{(m)}), \mathbf{K}_{\mathbf{uu}}^{\text{co}} _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} := \partial \mathbf{f}_c / \partial \mathbf{U} _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}}, \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}^{(m)}), \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{U}^{(m)})$	
Berechnung: $\tilde{g}_r^{(m)} := \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})$, $D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$ und $\boldsymbol{\Lambda}_{N_r}^{(m)} = \mathbf{n}_r^{(m)\text{T}} \boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{S}$	
Bestimmung Knotensätze: $\mathcal{A}^{(m)} = \{r \in \mathcal{S} \mid (\lambda_{N_r}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) > 0\}$, $\mathcal{I}^{(m)} = \{r \in \mathcal{S} \mid (\lambda_{N_r}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \leq 0\}$	
Assemblierung: $\tilde{\mathbf{g}}_{\mathbf{A}}^{(m)} := \tilde{\mathbf{g}}_{\mathbf{A}}(\mathbf{U}^{(m)}) = \sum_{r \in \mathcal{A}^{(m)}} \tilde{g}_r(\mathbf{U}^{(m)}) \mathbf{n}_{\mathbf{uA}} _{\mathbf{U}^{(m)}}$ und $\tilde{\mathbf{C}}_{\text{TI}}^{(m)} := \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{I}}^{(m)} = \sum_{r \in \mathcal{I}^{(m)}} \boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)}$	
(Reibung)?	
Ja	Nein
Berechnung: $\tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}^{(m)} := \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U}^{(m)})$, $D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U}^{(m)})[\Delta \mathbf{U}]$ und $\boldsymbol{\Lambda}_{\text{Tr}}^{(m)} := \boldsymbol{\tau}_r^{(m)\text{T}} \boldsymbol{\Lambda}_r^{(m)} \quad \forall r \in \mathcal{S}$	
Bestimmung Knotensätze: $\mathcal{H}^{(m)} = \{r \in \mathcal{A}^{(m)} \mid \mu_c(\lambda_{N_r}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) > \ \boldsymbol{\Lambda}_{\text{Tr}}^{(m)} + \kappa_{\tau} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}^{(m)}\ \}$, $\mathcal{G}^{(m)} = \{r \in \mathcal{A}^{(m)} \mid \mu_c(\lambda_{N_r}^{(m)} - \kappa_N \tilde{g}_r^{(m)}) \leq \ \boldsymbol{\Lambda}_{\text{Tr}}^{(m)} + \kappa_{\tau} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}^{(m)}\ \}$	
Berechnung und Assemblierung: $\tilde{\mathbf{C}}_{\text{TA}}^{(m)}, \mathbf{T}_{\mathbf{uA}} _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}}, \mathbf{T}_{\lambda\mathbf{AA}} _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}}$	
Konstruktion und Lösung des linearen Gleichungssystems (LGS)	
Dualer-Lagrange-Multiplikatoransatz	Standard-Lagrange-Multiplikatoransatz
Lösung red. LGS (statische Kondensation): $\tilde{\mathbf{K}} _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \Delta \mathbf{U}^{(m)} = -\tilde{\mathbf{G}}^{(m)}$ Nachlaufschritt: $\Delta \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{A}}^{(m)} = -\hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{AA}}^{-1} \hat{\mathbf{G}}_{\mathbf{A}}, \quad \Delta \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{I}}^{(m)} = -\boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{I}}^{(m)}$	Lösung orig. Sattelpunktsystem: $\mathbf{K} _{\hat{\mathbf{y}}^{(m)}} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{U}^{(m)} \\ \Delta \boldsymbol{\Lambda}^{(m)} \end{Bmatrix} = -\mathbf{G}^{(m)}$
Aktualisierung: $\mathbf{U}^{(m+1)} = \mathbf{U}^{(m)} + \Delta \mathbf{U}^{(m)}, \boldsymbol{\Lambda}^{(m+1)} = \boldsymbol{\Lambda}^{(m)} + \Delta \boldsymbol{\Lambda}^{(m)}$	

 Abbildung 5.28: Ablaufschema für einen globalen Berechnungsdurchlauf (m) des halbglattem Mehrebenen-Newton-Verfahrens

und Materialnichtlinearitäten sowie der mit den Kontaktrandbedingungen gepaarten Nichtlinearitätsressourcen erfolgt durch Interpretation der angewendeten Primal-Dualen Aktiven-Mengen-Strategie (PDASS) als semiglattes Newton-Verfahren in einer einzigen gemeinsamen Gleichgewichtsiterationsschleife. Zur Umsetzung des zuletzt genannten Mechanismus, also der Behandlung sämtlicher aus den Kontaktinteraktionen resultierenden Nichtlinearitäten, ist es notwendig, dass die in Abschnitt 5.5.5 erläuterte und in das iterative Lösungsschema integrierte PDASS sämtliche Ableitungsinformationen zur Aktualisierung der Knotensätze $\mathcal{A}^{(m)}$, $\mathcal{H}^{(m)}$, $\mathcal{G}^{(m)}$ und $\mathcal{I}^{(m)}$ enthält. Die nichtlinearen Komplementaritätsfunktionen (5.443) und (5.446) tragen diesem Sachverhalt inhärent Rechnung. Nach dem Zusammenbau des aus der konsistenten Linearisierung stammenden globalen, linearen Gleichungssystems (5.492) wird dieses bezüglich des Zuwachses $\Delta \mathbf{W}^{(m)\text{T}} = \{\Delta \mathbf{U}^{(m)\text{T}}, \Delta \mathbf{\Lambda}^{(m)\text{T}}\} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$ aufgelöst. Dies geschieht einerseits im Fall einer in der vorliegenden Arbeit vorzugsweise eingesetzten Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation mit Hilfe der in Abschnitt 5.7.2 beschriebenen statischen Kondensationsstrategie oder im Fall einer Interpolation mit Standard-Lagrange-Multiplikatoren durch Lösung des originalen Sattelpunktsystems (5.569). Mittels dem Inkrement $\Delta \mathbf{W}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$ kann der zu Beginn des iterativen Lösungsprozesses geschätzte Startwert $\mathbf{W}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$ sukzessive verbessert werden. Die Aktualisierung erfolgt in der Gestalt

$$\mathbf{W}^{(m+1)} = \mathbf{W}^{(m)} + \Delta \mathbf{W}^{(m)}. \quad (5.575)$$

Die skizzierte Prozedur wiederholt sich solange bis die vom Nutzer vorgeschriebenen Konvergenzkriterien für den Residuumsvektor¹⁴⁰ $\mathbf{G}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$ und das Inkrement der Lösungsvariable $\Delta \mathbf{W}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$, siehe hierzu exemplarisch [Kuhl, 1996; Belytschko et al., 2000; Bathe, 2002; Quint, 2012; Zienkiewicz et al., 2014], erfüllt sind. Zusätzlich muss die Konvergenz der slave-seitigen Knotengruppierungen $\mathcal{A}^{(m)}$, $\mathcal{H}^{(m)}$, $\mathcal{G}^{(m)}$ und $\mathcal{I}^{(m)}$ geprüft werden. Sind die zu bestimmenden Sätze $\mathcal{A}^{(m)}$, $\mathcal{H}^{(m)}$, $\mathcal{G}^{(m)}$ und $\mathcal{I}^{(m)}$ einmal fixiert, reduziert sich die iterative Lösungsmethodik auf einen gewöhnlichen Multilevel-Newton-Algorithmus, siehe Abschnitt 5.3. Als Folge hiervon sind im Rahmen einer exakten konsistenten Linearisierung lokal quadratische Konvergenzraten in der Nähe der gesuchten Lösung zu beobachten. Solange nicht der korrekte aktive Satz $\mathcal{A}^{(m)}$ bzw. $\mathcal{H}^{(m)}$ und $\mathcal{G}^{(m)}$ im Fall von Reibung determiniert sind und damit einhergehend der nichtlineare Charakter des Kontakts vollständig aufgelöst wurde, weist das halbglatte Mehrebenen-Newton-Verfahren immer noch superlineare Konvergenzeigenschaften auf.

5.8 Globale Kontaktsuche

Ein bisher noch nicht näher beleuchteter, jedoch als einer von enormer Bedeutung einzu-stufender, algorithmischer Aspekt für eine auf der Finiten-Elemente-Methode basierenden Kontaktformulierung stellt die Suche nach den potentiellen Kontaktpartnern dar. Hinter solchen Paaren von interagierenden Objekten können sich einerseits ganze Körper, Teile von Körpern, Oberflächen, Teilbereiche von Flächen oder auch einfach nur einzelne

¹⁴⁰ Gemäß Definition (5.537) bzw. (5.568) erfasst der globale Residuumsvektor $\mathbf{G}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{xu}}}$ neben dem Residuum des Kräftegleichgewichts $\mathbf{G}_{\text{u}}^{(m)} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ auch die residuale Einhaltung der Kontaktbedingungen.

diskretisierte Artefakte, wie Knoten oder Elemente, verbergen. Im Rahmen der in der vorliegenden Arbeit behandelten Kontaktproblematik, bei dem die deformierbaren Körper finiten Deformationsprozessen und großen Gleitbewegungen ausgesetzt sind, ändert sich die Kontaktsituation kontinuierlich. Es ist daher von absolut oberster Priorität, schnelle und robuste Suchalgorithmen zur Detektion der möglichen Kontaktpartner heranzuziehen. Die Entwicklung effizienter Kontaktsuchalgorithmen ist bereits seit den Anfängen der numerischen Kontaktmechanik Gegenstand intensiver Forschungsbestrebungen. So existieren in der Literatur eine Vielzahl von Ansätzen, die hinsichtlich der zu lösenden Kontaktproblematik und der angewendeten Kontaktdiskretisierung in diverse Kategorien selektierbar sind. Für einen umfassenden Überblick zu dieser Thematik sei auf die Monographie von Wriggers [2006, S. 309–320] verwiesen.

Im Folgenden soll ein kurzer Überblick zu dem in der vorliegenden Arbeit angewendeten Suchalgorithmus, mit Beschränkung auf das in Kapitel 3 illustrierte Zweikörper-Kontaktproblem, gegeben werden. Die nachstehende Schilderung orientiert sich dabei sehr stark an den Darstellungen in [Yang und Laursen, 2007]. Wie bereits in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 angesprochen, verlangt die Implementierung einer Mortar-Projektionsmethode in 3D oder 2D nach adäquaten Eingangsdaten in Gestalt sämtlicher potentiell überlappender Slave-Master-Elementpaare (e_S, e_M) , deren Vereinigung eine Berechnung der Mortar-Integrale \hat{D}_{rs} $r \in \mathcal{S}$, $s \in \mathcal{S}$, und \hat{M}_{rt} , $r \in \mathcal{S}$, $t \in \mathcal{M}$ gestattet. Dieses Aufspüren aller unmittelbar gegenüberliegenden Facettenpaare mit einem gewissen Überdeckungsgrad im Interface ist die primäre Aufgabe des globalen Suchalgorithmus.

Die Festlegung einer globalen Suchstrategie ist eine kritische Entscheidung, die sich auf die gesamtheitliche Effizienz einer mortar-basierten Kontaktformulierung auswirkt. So ergibt beispielsweise ein naiver Brute-Force-Ansatz¹⁴¹ für ein Problem mit $N := n_c^{e(1)}$ Slave-Elementen und $M := n_c^{e(2)} \approx N$ Master-Elementen eine Komplexität von $\mathcal{O}(N^2)$ Suchoperationen bis sämtliche überlappenden Facettenpaare detektiert sind. Mit Blick auf das zur Anwendung kommende iterative Lösungsschema vom Newton-Raphson-Typ, bei dem in jedem globalen Iterationsschritt (m) ein vollständiger Suchdurchlauf zur Aktualisierung der Eingangsdaten für den mortar-basierten Segmentierungsalgorithmus erforderlich ist, sind die Berechnungskosten für solch einen „Suchansatz der rohen Gewalt“, insbesondere für groß skalierende Rechnungen, unakzeptabel hoch. Aus diesem Grund bestehen effizientere Suchalgorithmen zumeist aus zwei wesentlichen Komponenten, nämlich einer hierarchischen globalen Suchstruktur und einer leistungsfähigen Geometrieapproximation für die auf Kollision¹⁴² zu testenden Elemente.

In der Pionierarbeit von Yang und Laursen [2007] wird erstmals eine Suchstrate-

¹⁴¹Die Brute-Force-Methode ist eine sehr populäre Lösungsmethode im Bereich der Informatik, die auf dem Ausprobieren aller möglichen Kombinationen basiert. Bezogen auf die globale Kontaktsuche bedeutet dies, dass alle Elemente der Slave-Seite gegen sämtliche master-seitigen Elemente auf Überlappung getestet werden.

¹⁴²Einhgehend mit der Weiterentwicklung der Computerwissenschaften und algorithmischen Geometrie werden zunehmend sogenannte Kollisionserkennungs- oder Kollisionsabfragealgorithmen zur globalen Kontaktsuche im Bereich der numerischen Kontaktmechanik eingesetzt. In der vorliegenden Arbeit sollen daher beide Begrifflichkeiten synonym füreinander gebraucht werden. Als Kollisionserkennung wird in der algorithmischen Geometrie die Detektion des Berührens oder des Überlappens zweier oder mehrerer geometrischer Objekte, wobei diese starr oder deformierbar sein können, im zwei- oder dreidimensionalen Raum verstanden.

gie auf Basis von Hüllkörperhierarchien¹⁴³ zur Kollisionserkennung der Slave-Master-Elementpaare vorgeschlagen. Als Hüllkörper bzw. Hüllvolumen¹⁴⁴ dienen sogenannte k -diskret orientierte Polytope (k -DOPs),¹⁴⁵ mit k den Hüllkörper begrenzenden Kanten in 2D oder k Beschränkungsflächen in 3D. Die Abb. 5.29a und 5.29b zeigen zwei exemplarische Beispiele solcher konvexen Hüllen im \mathbb{R}^2 , die eine Seite des Kontakt-Interface umschließen. Es ist offensichtlich, dass das achsparallele Begrenzungsrechteck (AABB),¹⁴⁶ welches das einfachste k -DOP zur Kontaktsuche im zweidimensionalen Raum repräsentiert, den hierin enthaltenen Körper nicht so kompakt begrenzt wie das 8-DOP. Obwohl verständlicherweise mit zunehmender Anzahl von $k/2$ zueinander parallel ausgerichteten Begrenzungslinienpaaren („Slabs“) die eigentliche Geometrierepräsentation des umschlossenen Objekts immer exakter angenähert werden kann, wird zur Beschränkung des numerischen Aufwands bei der Kollisionsdetektion und auf Empfehlung von Yang und Laursen [2007] ein 8-DOP zur Kontaktsuche im \mathbb{R}^2 verwendet. Den identischen Sachverhalt für eine dreidimensionale Problemstellung verdeutlichen die Abb 5.30a bis 5.30d, in

¹⁴³Eine Hüllkörperhierarchie beschreibt eine baumförmige Datenstruktur. Die in dieser hierarchisch strukturierten Topologie angeordneten Knoten speichern Informationen zu einzelnen Hüllkörpern, die wiederum ein oder mehrere komplexere geometrische Objekte umschließen. In der englischsprachigen Literatur werden für solch eine Datenstruktur häufig die Begriffe „bounding volume hierarchy“ (BVH) oder „bounding volume tree“ (BVT) verwendet. Anfänglich als probates Mittel im Bereich der Computergrafik im Kontext der Strahlenverfolgung, dem sogenannten „ray tracing“, zur Eliminierung potentieller Überlappungskandidaten in einer Bildszene verwendet, fand die Hüllkörperhierarchie später auch Einzug in die Kollisionserkennung. Weitere Details zum zuletzt genannten Einsatzgebiet können exemplarisch [Bergen, 1997; Klosowski et al., 1998; Larsson und Akenine-Möller, 2001; Teschner et al., 2005; Yang und Laursen, 2007] entnommen werden.

¹⁴⁴Ein Hüllkörper („bounding volume“) ist in der algorithmischen Geometrie ein einfacher geometrischer Körper, der ein komplexes geometrisches Objekt umschließt. Hüllkörper werden zumeist wegen ihrer gesteigerten Effizienz hinsichtlich der Durchführung von geometrischen Operationen bzw. geometrischen Abfragen verwendet.

¹⁴⁵Ein Polytop bezeichnet in der Geometrie ein verallgemeinertes Polygon in beliebiger Dimension. Die in der vorliegenden Arbeit als Hüllkörper eingesetzte konvexe k -DOP-Geometrie entspricht einem k -flächigen (3D) bzw. einem k -kantigen Polytop (2D). Dabei sind die k Begrenzungen eines k -DOPs immer paarweise zueinander in einer fixierten Orientierung ausgerichtet. Diese einfache geometrische Konstellation erlaubt es, ein k -DOP als die Schnittmenge von $k/2$ sogenannten „Slabs“ zu definieren. Jeder „Slab“ S_i^{slab} , $i = 1, \dots, k/2$, wird dabei durch den Raum zwischen zwei Hyperebenen, welche die durch den Normalenvektor $\mathbf{n}_i^{\text{slab}} = \text{const.}$, $i = 1, \dots, k/2$, festgelegte Orientierung aufweisen, abgegrenzt. Die auf den Ursprung des globalen Koordinatensystems bezogenen Distanzgrößen d_i^{\min} , $i = 1, \dots, k/2$, und d_i^{\max} , $i = 1, \dots, k/2$, zur nahen und fernen Begrenzungsseite des „Slabs“ vervollständigen die Definition von S_i^{slab} , $i = 1, \dots, k/2$. Die Berechnung von d_i^{\min} , $i = 1, \dots, k/2$, und d_i^{\max} , $i = 1, \dots, k/2$, erfolgt mit Hilfe der a priori fixierten Orientierungen $\mathbf{n}_i^{\text{slab}}$, $i = 1, \dots, k/2$. Anlässlich dieser bereits zum Kompilierungszeitpunkt feststehenden Richtungsangaben, empfiehlt es sich die Normalenvektoren $\mathbf{n}_i^{\text{slab}}$, $i = 1, \dots, k/2$, als globales Datenfeld anzulegen und nicht in jedem Speicherblock eines „Slabs“ mitzuführen. Unter Berücksichtigung der getroffenen Aussagen ist somit jeder „Slab“ S_i^{slab} , $i = 1, \dots, k/2$, eindeutig durch das Paar $S_i^{\text{slab}} := \{d_i^{\min}, d_i^{\max}\}$, $i = 1, \dots, k/2$, definiert. Hinsichtlich numerischer Aspekte entspricht der Normalenvektor $\mathbf{n}_i^{\text{slab}}$, $i = 1, \dots, k/2$, nicht notwendigerweise einem Einheitsvektor, sodass die Distanzen d_i^{\min} , $i = 1, \dots, k/2$, und d_i^{\max} , $i = 1, \dots, k/2$, zumeist nicht als real gemessene Abstände von der jeweiligen Ebene zum Koordinatenursprung interpretierbar sind. Für die auf Grundlage von d_i^{\min} , $i = 1, \dots, k/2$, und d_i^{\max} , $i = 1, \dots, k/2$, durchzuführenden Kollisionstests ist dies allerdings nicht von Relevanz.

¹⁴⁶Bei dieser Hüllkörperform handelt es sich um das minimal umgebende Rechteck, dessen achsparallele Seiten eine Gruppe von Objekten umschließen.

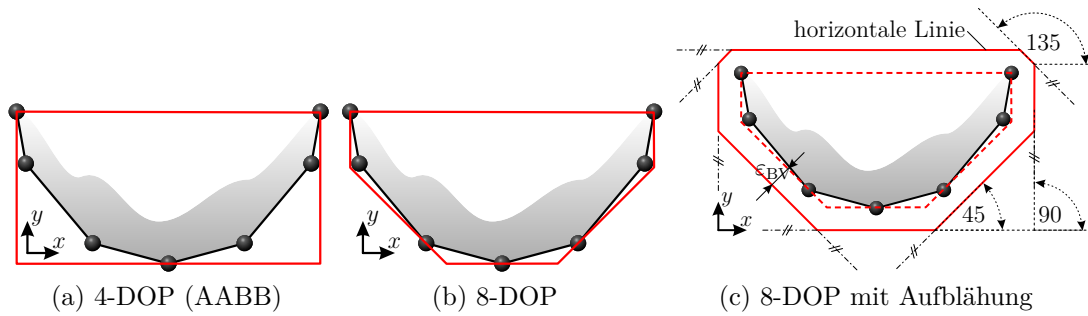


Abbildung 5.29: Hüllkörper in Gestalt von k -diskret orientierten Polytopen für zweidimensionale Problemstellungen

denen die verschiedenen k -DOP-Formen die zwei grün gefärbten, ineinander verschlungen Körper umhüllen. Gemäß dem Vorschlag in [Yang und Laursen, 2007] kommen für die dreidimensionale Kollisionserkennung 18-DOP-Formen, mit neun parallel zueinander angeordneten Begrenzungsflächenpaaren („Slabs“), zum Einsatz. Weitere Details zur Implementierung, Konstruktion sowie eine umfassende Illustration der diskret orientierten Polytope sind den exzellenten Arbeiten von Yang und Laursen [2007] und Yang und Laursen [2008] zu entnehmen. Der Vollständigkeit halber sei angemerkt, dass neben den diskret orientierten Polytopen eine Vielzahl anderer Hüllkörperformen existieren. Hierzu zählen beispielsweise achsparallele Begrenzungsrechtecke (AABB), die als Spezialfall für $k = 4$ im \mathbb{R}^2 bzw. für $k = 6$ im \mathbb{R}^3 in der k -DOP-Familie enthalten sind, sogenannte „oriented bounding boxes“ (OBBs) oder simple „bounding spheres“.

Wie schematisch in Abb. 5.31 dargestellt ist, werden beide vernetzten Interface-Seiten $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$ jeweils in einer hierarchischen Binärbaumstruktur¹⁴⁷ organisiert und gespeichert. In den einzelnen Knoten der Suchbäume sind dabei die Teilbereiche von $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$ in Gestalt der umgebenden Hüllvolumen bzw. deren zur Speicherung des Hüllkörpers benötigten Informationen hinterlegt. Darüber hinaus markieren die Enden, die sogenannten End- oder Blattknoten, des Baumes, in denen eine weitere binäre Verzweigung nicht möglich ist, die kleinsten Teilflächen der Interfacegeometrie. Für die konkret betrachtete Kontaktdiskretisierungsstrategie entsprechen diese primitiven Objekte den Elementen der Kontaktoberflächen. Um eine elementbezogene Zuordnung als Resultat der Kontaktsuche zu erhalten, ist der entsprechende Elementindex als zusätzliche Information in der Datenstruktur des Endknotens abzulegen. Die in den Ebenen darüber angeordneten Baumknoten (Eltern), für welche im Folgenden der Terminus innere Knoten gebraucht werden soll, enthalten nur die Beschreibung des Hüllvolumens in Form von Distanzinformationen der in einer fixen Orientierung ausgerichteten „Slabs“. Die Knoten der obersten Hierarchieebene tragen die Bezeichnung Wurzelknoten. Darüber hinaus treten die den Elternknoten zugeordneten Hüllvolumen als Container für alle mit den Kinderknoten assoziierten Hüllkörpern auf. Erst diese Eigenschaft ermöglicht die Implementation von effizienten Suchalgorithmen.

¹⁴⁷Neben der Topologie in Gestalt eines Binärbaums können die Hüllkörperhierarchien für die Slave- oder Master-Seite z. B. auch als „Octree“ oder k -dimensionaler Suchbaum (k -d-Baum) organisiert und gespeichert werden.

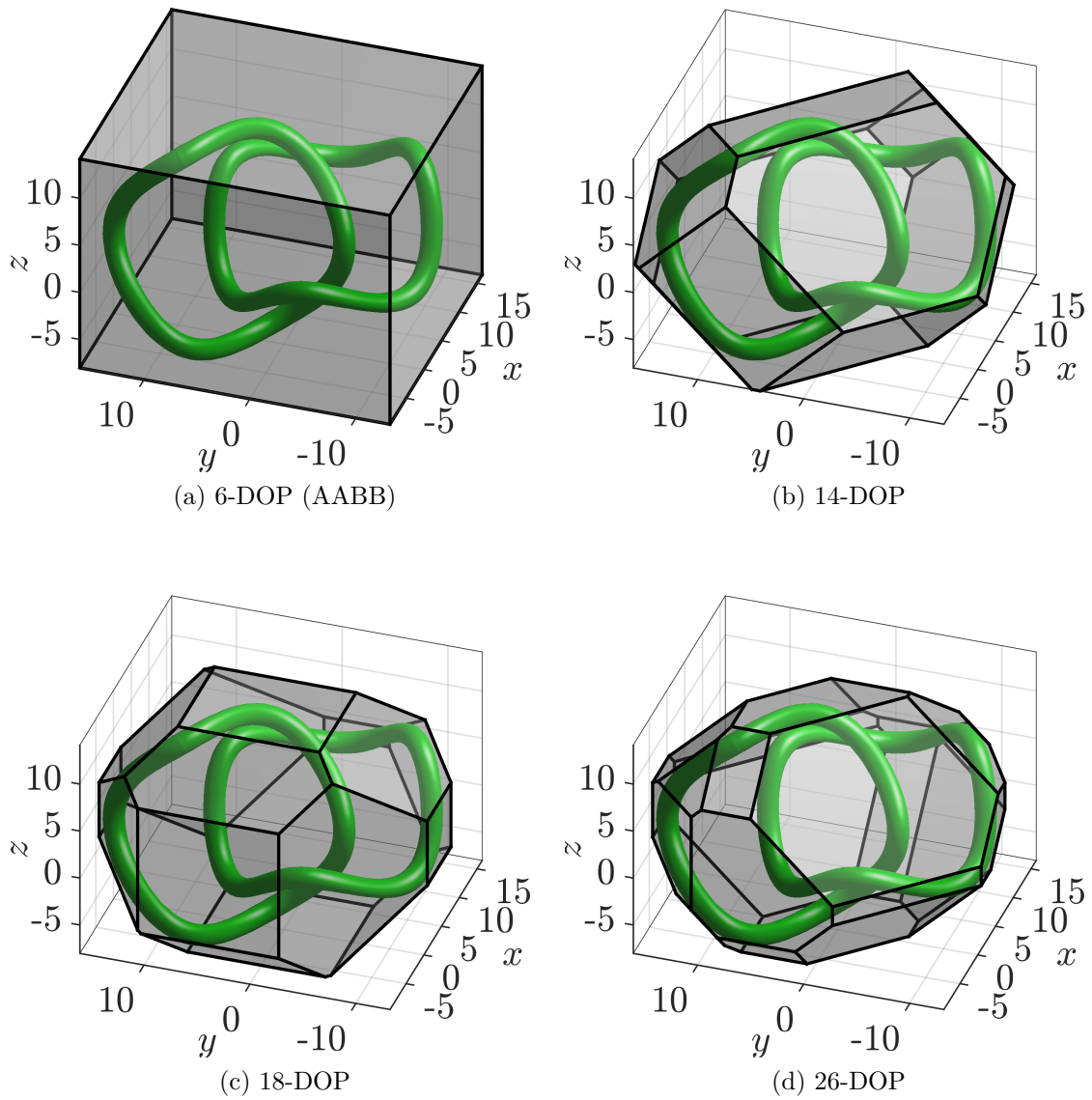


Abbildung 5.30: Hüllkörper in Gestalt von k -diskret orientierten Polytopen für dreidimensionale Problemstellungen

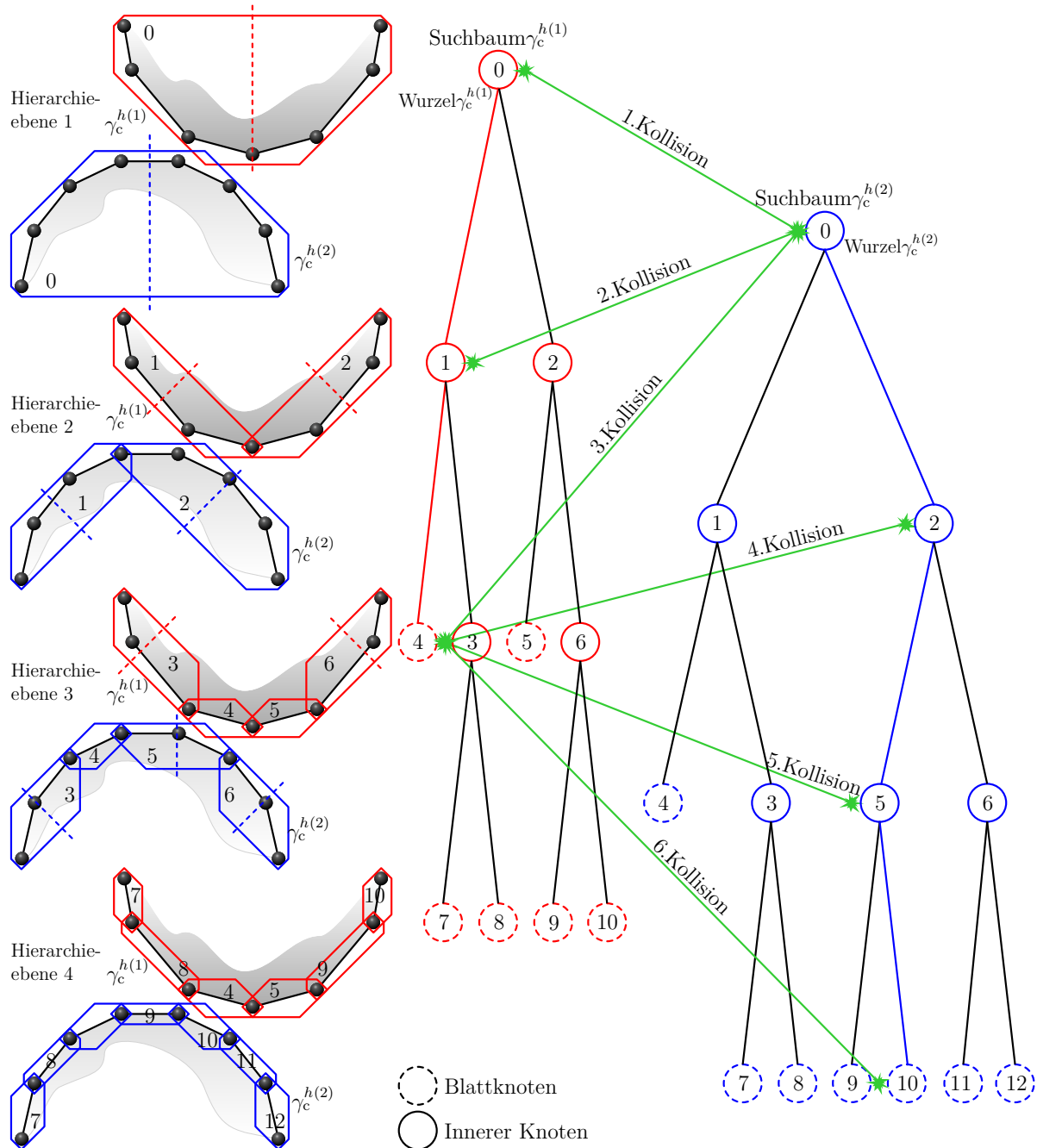


Abbildung 5.31: Visualisierung des globalen Suchalgorithmus für ein Zweikörper-Kontaktproblem in 2D basierend auf Hüllkörperhierarchien

Der Aufbau der Binärbäume¹⁴⁸ erfolgt für gewöhnlich nur ein einziges Mal während der Initialisierungsphase nach einem Top-Down- oder Bottom-Up-Prinzip. Im Rahmen des zuerst genannten Ansatzes wird der Konstruktionsprozess für den slave- bzw. master-seitigen binären Suchbaum durch die Erzeugung des Wurzelknotens, dessen k -diskret orientiertes Polytop die gesamte Interface-Seite umgibt, eingeleitet. Die facettierten Kontaktoberflächen $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$ werden anschließend rekursiv in immer kleinere Teilbereiche aufgespalten, wobei der diesen geometrischen Regionen zugeordnete Hüllkörper in einem neuen Knoten einer darunter liegenden Hierarchieebene (Kinderknoten) abgespeichert wird. Dieser Partitionierungsvorgang wiederholt sich solange bis die individuellen Elemente der Interface-Seite hervortreten und zu einer Konzipierung der Blattknoten in dem binären Suchbaum führen. Um einen möglichst balancierten Binärbaum zu erzeugen, existieren verschiedenste Teilungsregeln. Für einen umfassenden Überblick zu dieser Thematik sei auf [Bergen, 1997; Klosowski et al., 1998; Larsson und Akenine-Möller, 2001; Teschner et al., 2005; Andersen und Bay, 2006; Yang und Laursen, 2007] referiert. Das Bottom-Up-Prinzip findet zumeist zum Aufbau eines Suchbaums für Selbstkontakt Anwendung. Für weitere Details hierzu sei auf [Yang und Laursen, 2008] und die dort zitierte Literatur verwiesen.

Infolge der auf den Kontakträndern ablaufenden finiten Deformationsprozessen und großen Gleitbewegungen, ist eine deformations- bzw. positionsabhängige Aktualisierung aller Hüllkörpergeometrien nach jedem globalen Iterationsschritt (m) erforderlich. Wie Yang und Laursen [2007] zeigen, geschieht dies in Form einer Bottom-Up-Strategie. Hierzu werden die Hüllvolumen aller Elemente einer Interface-Seite neu berechnet und rekursiv zu den größeren Hüllkörpern der darüberliegenden Ebenen kombiniert. Die bei der Initialisierung des Baums erzeugten Verknüpfungen bleiben dabei alle erhalten. Lediglich das Aussehen der k -DOPs wird an den aktuellen Deformationszustand angepasst.

Die Suchprozedur selbst basiert auf einem rekursiven Algorithmus, der mit dem unkomplizierten Durchdringungs- bzw. Kollisionstest¹⁴⁹ zwischen den Wurzelknoten des slave- und master-seitigen Suchbaums beginnt. Falls eine Durchdringung der beiden obersten Hüllvolumen vorliegt, verzweigt sich der Kontaktsuchalgorithmus in die darunter liegenden Hierarchieebenen und wiederholt die trivialen Kollisionsabfragen für die dort in den Knoten platzierten Hüllvolumen. Die gesamte Detektionsprozedur endet mit dem Aufspüren sämtlicher potentiell überlappender Slave-Master-Elementpaare. Exemplarisch ist einmal in Abb. 5.31 solch ein Suchdurchlauf zum Auffinden der einzigen potentiellen Überschneidung in dem Interfacemodell zwischen dem slave-seitigen Blattknoten (4) und dem master-seitigen Endknoten (10) dargestellt. Die nummerierte Reihenfolge

¹⁴⁸Der Aufbau von Binärbäumen ist eine Technik in der Informatik, die als binäre Raumpartitionierung (BSP) bezeichnet wird.

¹⁴⁹In der Praxis werden die k -diskret orientierten Polytope häufig als Hüllkörpergeometrien gewählt, da sie die Implementation effizienter Kollisionserkennungs- und Aktualisierungsalgorithmen erlauben. Die Umsetzung des ersten Merkmals erfordert neben einer guten Packungsdichte zwischen dem Hüllkörper und dem eigentlich umschlossenen geometrischen Objekt, wodurch die Anzahl von Kollisionsabfragen zwischen den Suchbäumen reduziert wird, die Durchführbarkeit von einfachen Durchdringungstests. Letztere erweisen sich in Bezug auf k -diskret orientierte Polytope als denkbar einfach. Um die Durchdringung zweier k -DOPs zu registrieren, müssen lediglich die „Slabs“ mit der gleichen Orientierung miteinander verglichen werden. Sobald sich ein Paar von „Slabs“ der slave- und master-seitigen Hüllvolumen überlappt, ist die Kollision der beiden Hilfsgeometrien festgestellt.

der Kollisionsabfragen beschreibt dabei den Fortgang der Suche bis in die untersten Hierarchieebenen. Weiterhin ist festzuhalten, dass der globale Kontaktsuchalgorithmus sehr effizient arbeitet, falls die meisten Hüllkörper sich nicht durchdringen. Eine solche Situation beschreibt ebenfalls der rechte Teil von Abb. 5.31. So befindet sich das mit dem inneren Knoten ② assoziierte Hüllvolumen abseits von sämtlichen geometrischen Hilfskonstrukten des master-seitigen Suchbaums. Da bereits ein einziger Kollisionstest zwischen ② und dem Wurzelknoten ① diese Schlussfolgerung hervorbringt, sind die restlichen Durchdringungsabfragen zwischen den Kindern der Knoten nicht mehr erforderlich. Der Suchalgorithmus erkennt solch ein Szenario und kehrt in eine höhere Rekursionsebene des Kontaktdetektionsschemas zurück. Anschließend wird mit den verbliebenen Kombinationen fortgefahren. In einer theoretischen Analyse sagen Yang und Laursen [2007] für ein Kontaktproblem mit $N := n_c^{e(1)}$ Slave-Elementen und $M := n_c^{e(2)} \approx N$ Master-Elementen die Komplexität von $\mathcal{O}(4N \log(N))$ für den dort präsentierten globalen Suchalgorithmus voraus.

In einigen Fällen kann es vorkommen, dass die Modellstrukturen signifikant große Deformationen erfahren, sodass die Ausgangskonfigurationen der kontaktierenden Körper keinerlei Ähnlichkeit mehr mit den aktuellen Konfigurationen aufweisen. In solchen Situationen ist davon auszugehen, dass die globale Kontaktsuche nicht länger effizient abläuft. Die oben beschriebene Aktualisierungsprozedur ist nicht in der Lage, die drastisch veränderten Aufteilungsbereiche auszubalancieren. Erst ein kompletter Neuaufbau der Suchbäume kann diesen Konflikt auflösen.

Eine andere Problematik, welche mit enormen Deformationsinkrementen innerhalb eines Zeitschritts einhergeht, ist die Verwerfung von Facettenpaaren, obwohl eine physikalische Durchdringung dieser primitiven Objekte vorliegt. Ein sehr anschauliches Beispiel hierzu ist in der Arbeit von Yang und Laursen [2007] zu finden. Die gleichen Autoren schlagen als Gegenmaßnahme eine Aufblähung der Hüllkörpergeometrie vor. Einerseits wird diese Vergrößerung der Hüllkörper durch die Definition eines konstanten Parameters ε_{BV} , mit dem die Abstände zwischen den paarweise zueinander angeordneten Beschränkungsflächen additiv beaufschlagt werden, siehe Abb. 5.29c, erreicht. Gleichzeitig verhindert dieser Offset eine Degenerierung der k -DOP-Geometrie, bei denen die von dem Hüllkörper eingefassten Elemente eine identische Orientierung wie eine der Begrenzungsflächen aufweisen. Sind in der Kontaktschnittstelle die Kontaktpartner signifikanten Durchdringungsbewegungen ausgesetzt, ist die Festlegung eines ausreichend großen Parameterwerts für ε_{BV} von essentieller Bedeutung für eine konvergierende Lösungsprozedur. Damit die hierdurch gesteigerte Gesamtanzahl von Kollisionstests nicht zu stark die Effizienz der globalen Kontaktsuche herabsetzt, sollte die Wahl für ε_{BV} jedoch auch nicht zu hoch ausfallen. Yang und Laursen [2007] lösen diesen Konflikt, indem sie den Parameterwert für ε_{BV} an die Abmessungen der Interfacevernetzung koppeln. Eine andere Art der Aufblähung für den Hüllkörper berücksichtigt die Deformationshistorie. Die grundlegende Idee dieses Ansatzes ist es, den Hüllkörper neben der im aktuellen Iterationsschritt berechneten Positionierung des Interface-Elements auf Basis der Elementkonfiguration zum Zeitpunkt t_n zu konzipieren. Für weitere Details hierzu sei erneut auf [Yang und Laursen, 2007] referiert.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die globale Kontaktsuche nur eine Voraus-

wahl von potentiell überlappenden Slave-Master-Elementpaaren (e_S, e_M) basierend auf rein geometrischen Gesichtspunkten und einer approximativen Beschreibung der Interfacegeometrie vornimmt. Neben dem Erkennen von Kontakt bzw. von Durchdringung muss die globale Suchstrategie in der Lage sein, eventuell überlappende Facettenpaare, die lediglich in unmittelbarer Nähe zueinander positioniert sind, zu determinieren. Anschließend wird die Vorauswahl von Elementpaaren der präziseren mortar-basierten Segmentierungsprozedur, siehe Abschnitt 5.5.2 bzw. Abschnitt 5.5.3, unterworfen, welche die detektierte Überlappung von (e_S, e_M) bestätigt oder das Facettendupel verwirft. Diese Detektierungsphase trägt auch die Bezeichnung lokale Kontaktsuche bzw. lokale Kontaktdetektion, da dieser Schritt zumeist auf lokalen Projektionsberechnungen basiert. Die eigentliche Feststellung von Kontakt erfolgt erst im Rahmen der angewendeten Aktiven-Mengen-Strategie, siehe hierzu auch Abschnitt 5.5.5.

5.9 Skalierungstechnik für segmentbasierte Mortar-Methode

Wie bereits in Abschnitt 5.5.4.2 exemplarisch angedeutet, resultieren Kontaktprobleme in Verbindung mit der vorgestellten segmentbasierten Mortar-Methode, bei denen die facettierte Slave-Oberfläche $\gamma_c^{h(1)}$ nicht mehr vollständig von der Master-Seite $\gamma_c^{h(2)}$ überdeckt wird, in einer schlechten Konditionierung der tangentialen Gesamtsteifigkeitsmatrix. Der Grund hierfür liegt in den unterschiedlichen Größenordnungen der globalen Mortar-Integrale $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, $s \in \mathcal{S}$, und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$, $r \in \mathcal{S}$, $t \in \mathcal{M}$, die als Komponenten von $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuM}}$ in das zu lösende lineare Gleichungssystem (5.569) integriert werden. Für eine anschauliche Illustration dieser Problematik sei u. a. auch auf die Arbeiten von Cichosz und Bischoff [2011] und Popp et al. [2013] verwiesen. Um diese unerwünschte, der Kontaktformulierung anhaftende Begleiterscheinung zu vermeiden, schlägt die letztere Autorengruppe den Einsatz einer auf die Knoten von $\gamma_c^{h(1)}$ bezogenen Skalierungstechnik vor. Im Folgenden liegt der Fokus auf der Erläuterung der wesentlichsten Schritte dieser Skalierungsmethodik. Durch Einführen skalierten Versionen der diskreten Lagrange-Multiplikatoren, d. h.

$$\bar{\Lambda}_r = \kappa_r^* \Lambda_r \text{ und } \delta \bar{\Lambda}_r = \kappa_r^* \delta \Lambda_r \Leftrightarrow \Lambda_r = \bar{\Lambda}_r / \kappa_r^* \text{ und } \delta \Lambda_r = \delta \bar{\Lambda}_r / \kappa_r^* \quad \forall r \in \mathcal{S}, \quad (5.576)$$

gelingt es die Interpolationsformeln (5.300) und (5.301) in

$$\lambda(\mathbf{x}^{(1)}, t) \approx \lambda^h(\mathbf{x}^{h(1)}, t) = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r(\mathbf{x}^{h(1)}) \overbrace{\frac{\bar{\Lambda}_r(t)}{\kappa_r^*}}^{\lambda_r(t)} \quad (5.577)$$

und

$$\delta \lambda(\mathbf{x}^{(1)}) \approx \delta \lambda^h(\mathbf{x}^{h(1)}) = \sum_{r \in \mathcal{S}} \Xi_r(\mathbf{x}^{h(1)}) \overbrace{\frac{\delta \bar{\Lambda}_r}{\kappa_r^*}}^{\delta \lambda_r} \quad (5.578)$$

umzuschreiben.¹⁵⁰ Unter Zuhilfenahme der Interpolationsvorschrift (5.577) lässt sich die virtuelle Kontaktarbeit (4.52) in die semidiskrete Form

$$\delta\pi_c^h(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}) = \delta\mathbf{u}^T \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}), \quad \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}) = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{f}_c^{(1)}(\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}) \\ \mathbf{f}_c^{(2)}(\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}) \end{Bmatrix} = \mathbf{B}^*(\mathbf{u}) \mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}, \quad (5.579)$$

mit dem skalierten Interface-Operator

$$\mathbf{B}^*(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_{uuS} \times n_{uuN}} & \mathbf{D}^*(\mathbf{u}) & -\mathbf{M}^*(\mathbf{u}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uu}} \quad (5.580)$$

sowie den globalen Mortar-Matrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^*(\mathbf{u}) &= \sum_{r \in \mathcal{S}, s \in \mathcal{S}} \mathbf{A}_{rs} \mathbf{D}_{rs}(\mathbf{u}) \mathbf{I} = \left[\mathbf{D}_{rs}(\mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}} \quad \text{und} \\ \mathbf{M}^*(\mathbf{u}) &= \sum_{r \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{M}} \mathbf{A}_{rt} \mathbf{M}_{rt}(\mathbf{u}) \mathbf{I} = \left[\mathbf{M}_{rt}(\mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuM}}, \end{aligned} \quad (5.581)$$

überführen. Zur Herstellung der Äquivalenz der zwischen $\mathbf{B}^*(\mathbf{u})$ und dem Spaltenvektor

$$\mathbf{\Lambda} = \sum_{r \in \mathcal{S}} \mathbf{A}_r \mathbf{\Lambda}_r = \left\{ \mathbf{\Lambda}_1^T, \dots, \mathbf{\Lambda}_{n_S}^T \right\}^T \in \mathbb{R}^{n_{uuS}} \quad (5.582)$$

formulierten linearen Abbildung (5.579)₂ mit Gl. (5.320) sind die skalierten Mortar-Integrale definiert als

$$\mathbf{D}_{rs}^*(\mathbf{u}) = \frac{\hat{\mathbf{D}}_{rs}(\mathbf{u})}{\kappa_r^*} \quad \forall r, s \in \mathcal{S} \quad \text{und} \quad \mathbf{M}_{rt}^*(\mathbf{u}) = \frac{\hat{\mathbf{M}}_{rt}(\mathbf{u})}{\kappa_r^*} \quad \forall r \in \mathcal{S}, \quad t \in \mathcal{M}. \quad (5.583)$$

Eine analoge Behandlung erfahren die knotenspezifischen Kopplungsbedingungen in normaler und tangentialer Richtung. Ausgehend von Gl. (5.327) liegt nun unter Beachtung der von Gl. (5.576) abgeleiteten Beziehungen

$$\lambda_{Nr} = \lambda_{Nr}^* / \kappa_r^* \quad \text{und} \quad \delta\lambda_{Nr} = \delta\lambda_{Nr}^* / \kappa_r^* \quad (5.584)$$

die Normalkontaktbedingung für jeden Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ in Gestalt der knotenweise entkoppelten Variationsungleichung

$$(\delta\lambda_{Nr}^* - \lambda_{Nr}^*) g_r^* \geq 0 \quad \forall \delta\lambda_{Nr}^* \geq 0 \quad (5.585)$$

vor. Es ist offensichtlich, dass aus dem Substitutionsvorgang von $\lambda_{Nr} = \lambda_{Nr}^* / \kappa_r^*$ und $\delta\lambda_{Nr} = \delta\lambda_{Nr}^* / \kappa_r^*$ in Gl. (5.327) die skalierte Version der gewichteten Normalklaffung als

$$g_r(\mathbf{u}) = \tilde{g}_r(\mathbf{u}) / \kappa_r^* \quad (5.586)$$

¹⁵⁰Zur Unterscheidung sämtlicher skalierten Größen von den unmodifizierten Größen werden Erstere im Folgenden durch die Kennzeichnung (*) markiert.

hervorgeht. Ausgedrückt in Abhängigkeit der skalierten Größen λ_{Nr}^* und $g_r(\mathbf{u})$ lauten damit die semidiskreten KKT-Bedingungen in normaler Richtung

$$g_r \geq 0, \quad \lambda_{Nr}^* \geq 0, \quad g_r \lambda_{Nr}^* = 0 \quad \forall r \in \mathcal{S}. \quad (5.587)$$

In identischer Art und Weise werden die reibungsbehafteten Schlupfbedingungen der Skalierungsprozedur unterzogen. Nach Berücksichtigung der Definitionen

$$\lambda_{Tr} = \lambda_{Tr}^* / \kappa_r^* \quad \text{und} \quad \delta \lambda_{Tr} = \delta \lambda_{Tr}^* / \kappa_r^* \quad (5.588)$$

sowie von

$$\mathbf{v}_{Tr} = \tilde{\mathbf{v}}_{Tr} / \kappa_r^* \quad (5.589)$$

resultiert die Aussage

$$\begin{aligned} f_{\tau r}^* &= \|\lambda_{Tr}^*\| + \mu_c |\lambda_{Nr}^*| \\ \mathbf{v}_{Tr} - \gamma_{\tau r}^* \lambda_{Tr}^* &= \mathbf{0}, \quad \gamma_{\tau r}^* \geq 0, \quad f_{\tau r}^* \leq 0, \quad \gamma_{\tau r}^* f_{\tau r}^* = 0 \quad \forall r \in \mathcal{S}. \end{aligned} \quad (5.590)$$

Spielt die Modellierung von Effekten, wie Rutschhaftung, nur eine untergeordnete Rolle, ersetzen die reibungslosen Kontaktbedingungen in Tangentialrichtung

$$\lambda_{Tr}^* = \tau_r^T \lambda_r^* = \mathbf{0} \quad \forall r \in \mathcal{S} \quad (5.591)$$

Gl. (5.590). Zum Abschluss der Herleitungen in Bezug auf die aus der Skalierungsprozedur hervorgehenden Gleichungsstrukturen fasst Tabelle 5.12 die gesamte zu lösende semidiskrete Problemformulierung noch einmal zusammen. Die weiteren Lösungsschritte, d. h. die zeitliche Diskretisierung der semidiskreten Strukturgleichungen bis hin zur Applikation einer iterativen Lösungsprozedur vom Newton-Raphson-Typ, gehen absolut konform mit den Abschnitten 5.6 und 5.7 einher, sodass für zusätzliche Erklärungen hierzu die genannten Passagen der Arbeit zu konsultieren sind. Die Rekonstruktion der eigentlich physikalischen Kontaktspannungen λ_r , $r \in \mathcal{S}$, aus λ_r^* , $r \in \mathcal{S}$, gelingt durch Anwendung von Gl. (5.576)₃ als eine nachgeschaltete Berechnungsanweisung am Ende jedes Zeitschritts.

Ein wesentlicher, bisher noch nicht angesprochener Aspekt, ist die Definition des heuristischen Skalierungsfaktors κ_r , $r \in \mathcal{S}$, sodass unabhängig von dem tatsächlich an der Kontaktinteraktion teilnehmenden Slaveoberflächenbereich $\tilde{\gamma}_c^{h(1)} \subset \gamma_c^{h(1)}$ die skalierten Mortar-Integrale $\bar{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\bar{M}_{rt}(\mathbf{u})$ stets dieselbe Größenordnung aufweisen. Popp et al. [2013] schlagen zu diesem Zweck den folgenden, mit dem Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ verflochtenen Ansatz vor:

$$\begin{aligned} \kappa_r(\mathbf{u}) &= \frac{1}{n_r^{\text{adj}}} \sum_{e=1}^{n_r^{\text{adj}}} \frac{1}{\alpha_r^{e(1)}} \int_{\tilde{\gamma}^{e(1)}} \frac{N_r^{(1)}}{\det \mathbf{j}^{e(1)}} \overbrace{\det \mathbf{j}^{e(1)} d\Omega_{\square}^{(1)}}^{d\gamma^{e(1)}}, \quad \text{mit} \\ \alpha_r^{e(1)} &= \int_{\gamma^{e(1)}} \frac{N_r^{(1)}}{\det \mathbf{j}^{e(1)}} \det \mathbf{j}^{e(1)} d\Omega_{\square}^{(1)} = \int_{\gamma^{e(1)}} N_r^{(1)} d\Omega_{\square}^{(1)} \end{aligned} \quad (5.592)$$

Tabelle 5.12: Semidiskretes strukturdynamisches Algebro-Differentialgleichungssystem zur Behandlung eines unilateralen Kontaktproblems mit skalierten Interfacegrößen

Zur Berechnung von $\mathbf{u}(t)$, $\mathbf{\Lambda}^*(t)$ und $\mathbf{q}(t)$ im Intervall $t \in [t_0, t_e]$ ist das semidiskrete DAE-System

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) &= -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}^*, \mathbf{q}, t) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t), \\ \dot{\mathbf{q}}(t) &= \mathbf{r}_Q(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t), \end{aligned}$$

mit

$$\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}^*, \mathbf{q}, t) = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) - \mathbf{f}_{\text{ext}}(\mathbf{u}, t) + \mathbf{f}_c(\mathbf{u}, \mathbf{\Lambda}^*),$$

den normalen Kontaktbedingungen

$$g_r^* \geq 0, \quad \lambda_{Nr}^* \geq 0, \quad g_r^* \lambda_{Nr}^* = 0, \quad \forall r \in \mathcal{S}, \quad (5.587)$$

den tangentialen Kontaktbedingungen für das Coulombsche Reibgesetz

$$\begin{aligned} f_{\tau r}^* &= \|\boldsymbol{\lambda}_{\tau r}^*\| + \mu_c |\lambda_{Nr}^*| \\ \mathbf{v}_{\tau r}^* - \gamma_{\tau r} \boldsymbol{\lambda}_{\tau r}^* &= \mathbf{0}, \quad \gamma_{\tau r} \geq 0, \quad f_{\tau r}^* \leq 0, \quad \gamma_{\tau r} f_{\tau r}^* = 0 \quad \forall r \in \mathcal{S}, \end{aligned} \quad (5.590)$$

bzw. den tangentialen Kontaktbedingungen für den reibungsfreien Fall

$$\boldsymbol{\lambda}_{\tau r}^* = \boldsymbol{\tau}_r^T \boldsymbol{\Lambda}_r^* = \mathbf{0} \quad \forall r \in \mathcal{S}, \quad (5.591)$$

sowie den Anfangsbedingungen

$$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{v}_0, \quad \mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$$

zu lösen.

Hierin repräsentieren n_r^{adj} die Anzahl der im Stoßpunkt $r \in \mathcal{S}$ verbundenen Elemente e , $e = 1, \dots, n_r^{\text{adj}}$, und $d\Omega_{\square}^{(1)}$ das infinitesimale Flächendifferential im Referenzgebiet eines Slave-Elements $\Omega_{\square}^{(1)}$. Die angezeigte Deformationsabhängigkeit des mit Hilfe von Gl. (5.592) berechneten Skalierungsfaktors κ_r , $r \in \mathcal{S}$, rührt aus der Integration über das tatsächlich an der Kontaktinteraktion involvierte Elementgebiet $\tilde{\gamma}^{e(1)} \subseteq \gamma^{e(1)}$. Der Quotient $1/\alpha_r^{e(1)}$, $r \in \mathcal{S}$, innerhalb der Summe über die benachbarten Elemente von $r \in \mathcal{S}$ stellt sicher, dass für $\tilde{\gamma}^{e(1)} = \gamma^{e(1)}$ der jeweilige Integralbeitrag des Elements zum Skalierungsfaktor κ_r , $r \in \mathcal{S}$, auf den Wert Eins normiert wird. Falls alle $\gamma_c^{h(1)}$ alle Facettengebiete $\tilde{\gamma}^{e(1)}$ vollständig von der gegenüberliegenden Master-Seite $\gamma_c^{h(2)}$ überdeckt werden, d. h. $\tilde{\gamma}^{e(1)} = \gamma^{e(1)}$, garantiert die Bildung des arithmetischen Mittelwerts so einen ordnungsgemäßen Skalierungsfaktor $\kappa_r = 1$. Weiterhin ist ersichtlich, dass der Divisor $\alpha_r^{e(1)}$, $r \in \mathcal{S}$, siehe Gl. (5.592)₂, nur vom gewählten slave-seitigen Elementtyp abhängt und damit a priori in Gestalt eines konstanten Parameters determinierbar ist. Für die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Oberflächenelementformen, siehe Tab. B.1, sind die möglichen Parameterwerte von $\alpha_a^{e(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, bezogen auf die lokale Knotenummerierung eines Slave-Elements $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, in Tab. 5.13 zusammengestellt.

Tabelle 5.13: Parameterwerte für $\alpha_a^{e(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, siehe Definition (5.592)₂, für verschiedene Oberflächenelementtypen

	Lin2	Lin3	
$\alpha_a^{e(1)} =$	1	$\begin{cases} 1/3, & a = 1, 2 \\ 4/6, & a = 3 \end{cases}$	
	Tri3	Tri6	
$\alpha_a^{e(1)} =$	1/6	$\begin{cases} 0, & a = 1, 2, 3 \\ 1/6, & a = 4, 5, 6 \end{cases}$	
	Quad4	Quad8	Quad9
$\alpha_a^{e(1)} =$	1	$\begin{cases} -1/3, & a = 1, \dots, 4 \\ 4/3, & a = 5, \dots, 8 \end{cases}$	$\begin{cases} 1/9, & a = 1, \dots, 4 \\ 4/9, & a = 5, \dots, 8 \\ 16/9, & a = 9 \end{cases}$

Alternativ ist der Parameter $\alpha_a^{e(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, auch als die Eigenschaft der integralen Positivität von $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, im Referenzgebiet $\Omega_{\square}^{(1)}$ interpretierbar. Wie bereits ausführlich in Abschnitt 5.5.4.1 diskutiert, liefern einige lokale Knoten der Randknotenelemente (Tri6, Quad8) unbrauchbare Werte für $\alpha_a^{e(1)}$. Aus diesem Grund werden solche quadratischen Facettentypen von einer Skalierung mit κ_r , $r \in \mathcal{S}$, ausgeschlossen.

Zur numerischen Umsetzung der Integrationsvorschrift über das partielle Elementgebiet $\tilde{\gamma}^{e(1)} \subseteq \gamma^{e(1)}$, siehe Gl. (5.592)₁, werden abermals die bereits in den Abschnitten 5.5.2 und 5.5.3 vorgestellten segmentbasierten Quadraturkonzepte herangezogen. Analog zur

Beziehung (5.419) lautet damit eine dreidimensionale algorithmische Umsetzung von Gl. (5.592):

$$\kappa_r^*(\mathbf{u}) = \frac{1}{n_r^{\text{adj}}} \sum_{e=1}^{n_r^{\text{adj}}} \frac{1}{\alpha_r^{e(1)}} \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{\text{es}}} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g N_r^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \frac{\det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g)}{\det \mathbf{j}^{e(1)}(\xi_g^{(1)})} \quad (5.593)$$

Unter Austausch der Segmentierungsstrategie ergibt sich konform zu Gl. (5.423) im \mathbb{R}^2 die Beziehung:

$$\kappa_r^*(\mathbf{u}) = \frac{1}{n_r^{\text{adj}}} \sum_{e=1}^{n_r^{\text{adj}}} \frac{1}{\alpha_r^{e(1)}} \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^{\text{es}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g N_r^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \frac{\det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g)}{\det \mathbf{j}^{e(1)}(\xi_g^{(1)})} \quad (5.594)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass im Rahmen einer iterativen Lösungsprozedur aufwendige und rechenintensive konsistente Linearisierungsoperationen zur Bestimmung von $D_{\mathbf{u}} \kappa_r^*(\mathbf{u}^{(m)})[\Delta \mathbf{u}]$, $r \in \mathcal{S}$, in jedem globalen Newton-Schritt (m) notwendig sind, siehe auch [Popp et al., 2013]. Dabei ist problemspezifisch abzuwägen, ob der hierdurch induzierte gesteigerte Berechnungsaufwand im Vergleich zu einem mortar-basierten Kontaktalgorithmus ohne Skalierung mit den Vorteilen der Skalierungsprozedur aufgewogen werden kann.

Um die Leistungsfähigkeit und den positiven Einfluss der erörterten Skalierungstechnik zu veranschaulichen, wird im Folgenden die zweidimensionale Kontaktproblematik aus Abb. 5.32 eingehender betrachtet. Das zu analysierende quasistatische Berechnungsmodell

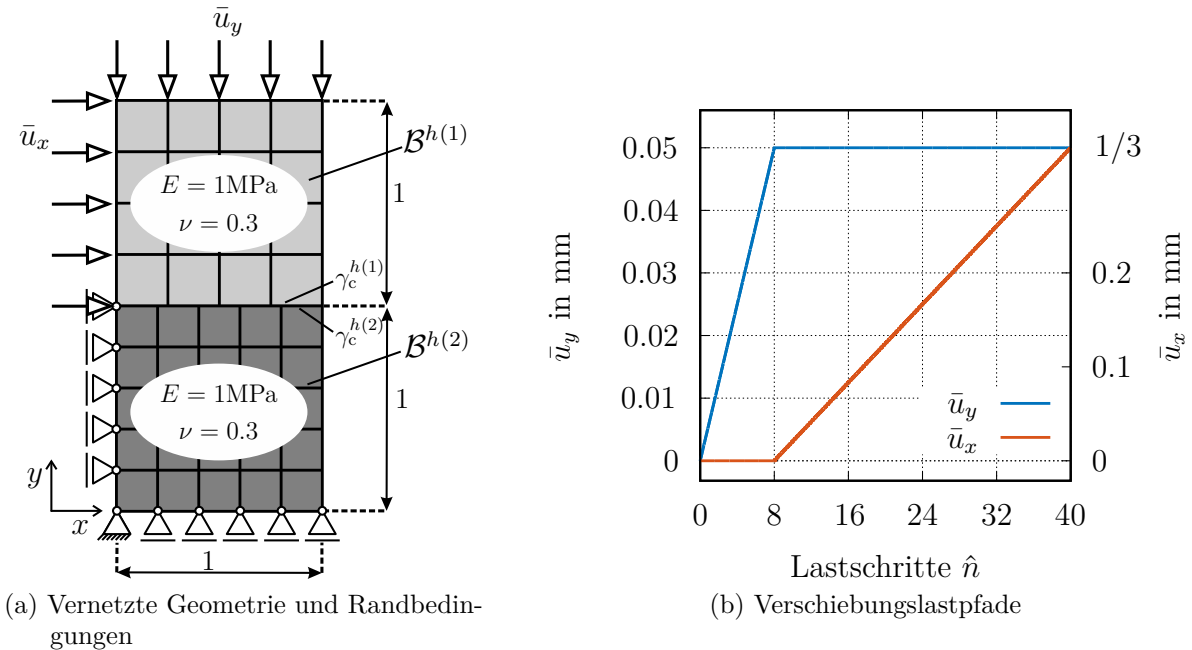


Abbildung 5.32: Berechnungsmodell zweier reibungsfrei aufeinander abgleitender quadratischer Körper; Visualisierung des zugehörigen Belastungsprozesses

besteht aus zwei nicht-konform, mit bilinearen finiten Elementen (Quad4) vernetzten

Quadraten, die gemäß Abb. 5.32b in den ersten acht Lastschritten (Zeitschritten)¹⁵¹ durch eine vertikale, monoton anwachsende Verschiebungsrandbedingung \bar{u}_y aufeinander gepresst werden. Während der anschließenden Fixierung von \bar{u}_y auf $\bar{u}_y = 5 \times 10^{-2}$ mm gleitet der obere Körper $\mathcal{B}^{h(1)}$ entsprechend dem Lastpfad \bar{u}_x in dem daran anknüpfenden Zeitintervall reibungsfrei über die rechte steil abfallende Kante von $\mathcal{B}^{h(2)}$, wobei $\mathcal{B}^{h(2)}$ gemäß der in Abb. 5.32a schematisch dargestellten Fest-Los-Lagerung im zweidimensionalen Raum fixiert bleibt. Die Lastinkrementierung für \bar{u}_x und \bar{u}_y erfolgt innerhalb von 40 Lastschritten. Entsprechend der Indexierung der kontaktierenden Körper fällt die Wahl für die obere Interface-Seite auf die Slaveoberfläche $\gamma_c^{h(1)}$. Direkt darunter angeordnet, befindet sich die Masteroberfläche $\gamma_c^{h(2)}$. Der Deformationsprozess, siehe Abb. 5.33, endet nachdem

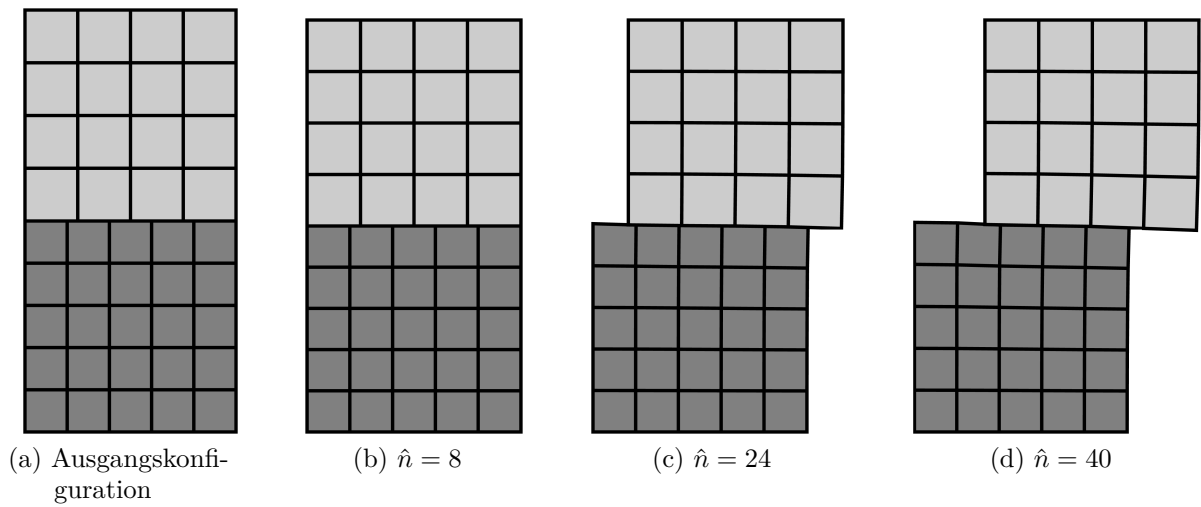


Abbildung 5.33: Visualisierung des Deformationszustands an unterschiedlichen Lastinkrementen \hat{n} des in Abb. 5.32 spezifizierten Berechnungsmodells

das rechte linienförmige Interface-Element von $\gamma_c^{h(1)}$ vollständig freigelegt ist. Für beide zweidimensionalen Blöcke wird außerdem ein schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten vom Neo-Hooke-Typ, mit dem Elastizitätsmodul $E = 1 \text{ N mm}^{-2}$ und der Querkontraktionszahl $\nu = 0.3$, angenommen. Die zugehörige Formänderungsenergie für das hyperelastische Materialmodell ergibt sich aus einer additiven Komposition des zweiten energetischen Ansatzes aus Tab. 2.5 und des isochoren Energieanteils aus der ersten Zeile von Tab. 2.6. Um die im Rahmen der vorliegenden Arbeit eingesetzte Parametrisierung des Konstitutivmodells in Abhängigkeit des Kompressionsmoduls K und der Elastizitätskonstanten c_{10} durchgehend konsistent zu verwenden, lassen sich E und ν

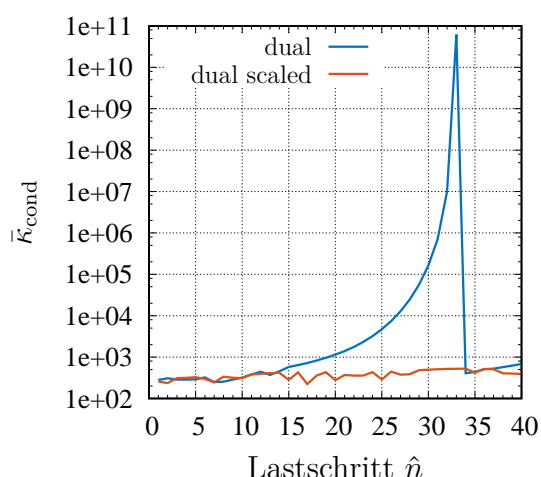
¹⁵¹Im Rahmen einer nichtlinearen statischen Systemanalyse kontrolliert die Zeit bzw. die sogenannte „Pseudozeit“ lediglich die sukzessive Lastaufbringung in Form von Lastschritten zur Gewährleistung der Konvergenz der iterativen Lösungsprozedur. Entgegen der Indexierung eines Zeitschritts $[t_n, t_{n+1}]$ bzw. des Zeitinkrements $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$, $n = 0, \dots, N-1$, siehe Abschnitt 5.2.1, werden in der vorliegenden Arbeit die Lastschritte durch \hat{n} , $\hat{n} = 1, \dots, N$, gekennzeichnet. Der Bezug zum Zeitinkrementindex n lässt sich über $n = \hat{n} - 1$ herstellen.

mit Hilfe der Umrechnungen

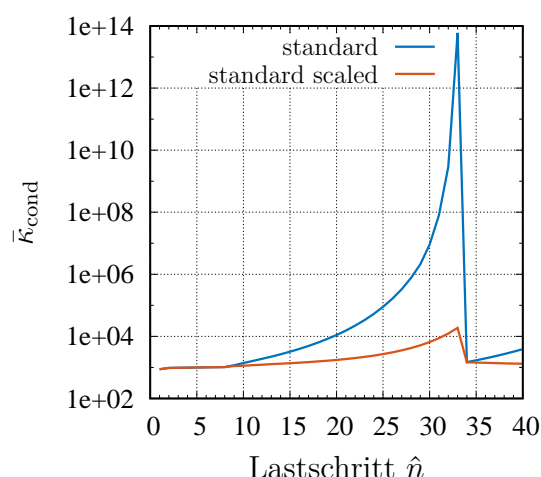
$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad \text{und} \quad c_{10} = \frac{E}{4(1+\nu)}$$

in die Materialkennwerte K und c_{10} transformieren. Die Annahme eines ebenen Verzerungszustands komplettiert die Definition des mathematischen Modells.

Es ist offensichtlich, dass für das illustrierte Interfaceproblem auch nach einer invertierten Wahl von $\gamma_c^{h(1)}$ und $\gamma_c^{h(2)}$ partiell integrierte Slave-Elemente nicht zu vermeiden sind. Aus diesem Grund repräsentiert das exemplarische unilaterale Kontaktproblem den idealen Präzedenzfall, um im Rahmen einer Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation die Dringlichkeit für einen segmentbasierten Konstruktionsansatz der dualen Ansatzfunktionen, siehe Abschnitt 5.5.4.2, in Erinnerung zu rufen. Denn nur Letzterer ist in der Lage, eine Diagonalstruktur der globalen Kopplungsmatrix $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ zu erhalten sowie eine damit einhergehende konsistente und konvergierende duale Mortar-Methode sicherzustellen. Für solch ein mortar-basiertes Berechnungskonzept (dual) ist in Abb. 5.34a die Entwicklung der gemittelten Konditionszahl $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$, die aus der arithme-



(a) Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation mit und ohne Skalierungstechnik



(b) Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation mit und ohne Skalierungstechnik

Abbildung 5.34: Entwicklung der gemittelten Konditionszahl $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$ für die tangentiale Gesamtsteifigkeitsmatrix des in Abb. 5.32 spezifizierten Berechnungsmodells in Abhängigkeit des durch eine Gleitbewegung dominierenden Deformationsprozesses

tischen Mittelwertbildung $\bar{\kappa}_{\text{cond}} = 1/n_{\text{Newt}} \sum_{m=1}^{n_{\text{Newt}}} \bar{\kappa}_{\text{cond}}^{(m)}$, über sämtliche n_{Newt} in einem Lastschritt \hat{n} anfallenden Konditionszahlen der tangentialen Gesamtsteifigkeitsmatrizen $\bar{\kappa}_{\text{cond}}^{(m)} = \text{cond } \mathbf{K}|_{\mathbf{y}^{(m)}}$, $m = 1, \dots, n_{\text{Newt}}$, hervorgeht, in Abhängigkeit des Lastinkrements \hat{n} , $\hat{n} = 1, \dots, 40$, dargestellt. Wie allerdings Abb. 5.34 ebenfalls unverhüllt aufgezeigt, gehen mit den segmentbasierten Quadraturkonzepten (dual, standard), siehe Abschnitte 5.5.2 und 5.5.3, auch Nachteile einher. So ist die eingangs des vorliegenden Abschnitts unterstellte schlechte Konditionierung des linearen Gleichungssystems (5.569) offenkundig. Nach Passieren von $\hat{n} = 24$ nimmt $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$ überproportional zu. Dieser Effekt

ist auf den abnehmenden Integrationsbereich des rechten Slave-Elements, welcher die mit diesem slave-seitigen Interface-Element assoziierten Einträge in $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ schrumpfen lässt, zurückzuführen. Als Folge hiervon überträgt sich die schlechte Kondition der globalen Mortar-Operatoren $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ auf das globale linearisierte Gleichungssystem (5.569). Nach Kopplung der dualen Mortar-Methode mit der beschriebenen Skalierungstechnik (dual scaled) ist in Abb. 5.34a eine signifikante Verbesserung hinsichtlich der Evolution der gemittelten Konditionszahl $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$, die sich in einem optimalen, annähernd konstanten Verlauf für $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$ auf dem niedrigen Ausgangsniveau $\bar{\kappa}_{\text{cond}} \approx 3 \times 10^2$ manifestiert, zu verzeichnen. Der illustrierte Sachverhalt liegt offensichtlich in der positiven Wirkung des Skalierungsfaktors (5.592) begründet. Bei genauerer Analyse von Gl. (5.592) ist festzustellen, dass $\hat{\kappa}_r^*$, $r \in \mathcal{S}$, im selben Maß wie die Mortar-Integrale $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ abnimmt und so die Größenordnung der skalierten Pendants $\check{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\check{M}_{rt}(\mathbf{u})$ erhält. Weiterhin zeigt die Abb. 5.34b den Verlauf von $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$ bei Behandlung des Kontaktproblems in Verbindung mit einer Standard-Lagrange-Multiplikator Interpolation. Erneut zuallererst bezugnehmend auf die nicht skalierte Version der mortar-basierten Kontaktformulierung (standard), zeichnet sich auch hier die durch das segmentbasierte Quadraturkonzept induzierte schlechte Konditionierung der tangentialen Gesamtsteifigkeitsmatrix deutlich ab. Entgegengesetzt hierzu ist allerdings auch in Abb. 5.34b die eindrucksvolle positive Einflussnahme von $\hat{\kappa}_r^*$, $r \in \mathcal{S}$, zu erkennen. Obwohl die Inklusion der Skalierung in das Berechnungskonzept (standard scaled) nicht in einem konstanten Verlauf für $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$ mündet, ist es dennoch möglich, die Zunahme der arithmetisch gemittelten Konditionszahl auf maximal eine weitere Dekade zu limitieren. Wie Popp et al. [2013] eingehend schildern, lässt sich die leichte Verschlechterung des skalierten Ansatzes (standard scaled) in $\bar{\kappa}_{\text{cond}}$ auf die komplexere Struktur der Mortar-Matrizen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ zurückführen, für deren Komponenten $\hat{D}_{rs}(\mathbf{u})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{u})$ die Zu- bzw. Abnahmeraten nun im Vergleich zum Skalierungsfaktor $\hat{\kappa}_r^*$ differieren. Für detailliertere Erläuterungen zur Arbeitsweise der vorgestellten Skalierungstechnik sei auf [Popp et al., 2013] referiert.

6 Numerische Beispiele

Das folgende Kapitel dient dazu, die Leistungsfähigkeit der vorgestellten numerischen Konzepte und Lösungsalgorithmen anhand einiger repräsentativer Beispiele zu demonstrieren. Alle Berechnungen wurden mit Hilfe des *Inhouse*-Codes *Tasafem*, ein am Institut für Technische Mechanik der TU-Clausthal entwickeltes Finite-Elemente-Programm für raum-zeitadaptive gekoppelte Strukturberechnungen, siehe [Hartmann, 2006a], angefertigt. Das Programm zur Behandlung von generalisierten Mehrfeldproblemstellungen ist vollständig in Fortran geschrieben und abgesehen von der Initialisierungsprozedur weitestgehend mit **OpenMP**-Konstrukten parallelisiert, siehe [Chapman et al., 2008]. Darüber hinaus wird zur Kompilierung der Intel-Fortran-Compiler verwendet. Für die Durchführung von arithmetischen Operationen wird auf die in der **MKL**-Bibliothek integrierten optimierten Unterprogramme, wie beispielsweise **BLAS**- und **LAPACK**-Routinen, zurückgegriffen. Sämtliche Berechnungen sind bei doppelt genauer Arithmetik angefertigt worden.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde der Finite-Elemente-Code zur Einbeziehung von Strukturmechanik um zahlreiche Komponenten ergänzt. Bereits vorhandene Finite-Elemente-Formulierungen, Zeitintegrationsschemata und iterative Lösungsprozeduren wurden hierzu adaptiert.

Zur Implementation einer effizienten mortar-basierten Kontaktformulierung waren umfangreiche Neustrukturierungsmaßnahmen der bestehenden Module erforderlich, insbesondere hinsichtlich des Datenmanagements. Dies umfasste zum einen die Speicherformate der Funktionalmatrizen, die mit einer komprimierten Zeilenspeicherung, dem **CRS**-Format¹ für dünnbesetzte Matrizen, im Kernspeicher des Rechners gehalten werden. Zum anderen wurden komplexe Datentypen für die mortar-basierte Interfacediskretisierung eingeführt und so organisiert, dass sie eine effiziente Parallelisierung mit OpenMP gestatten.

Die Lösung der im Zuge der konsistenten Linearisierung resultierenden linearen Gleichungssysteme erfolgte mittels **PARDISO**, siehe hierzu [Schenk und Gärtner, 2004], einem parallelen Gleichungslöser für spärlich besetzte, unsymmetrische Matrizen. Hinsichtlich einer effizienten Umsetzung wurde im *Inhouse*-Code *Tasafem* das Datenmanagement für den linearen Gleichungslöser vollständig überarbeitet.

Für die Generierung der mit finiten Elementen vernetzten Modelle im Preprozess und der Auswertung der Berechnungsergebnisse im Postprozess wurden Schnittstellen zu dem Softwarepaket GiD, einem Pre- und Postprozessor, das vom „International Center for Numerical Methods in Engineering“ (CIMNE) entwickelt wird, grundlegend erneuert.

¹„Compressed row storage“ (CRS) oder „compressed sparse row“ (CSR) ist ein häufig genutztes Speicherformat für dünnbesetzte Matrizen.

6.1 Strukturdynamische Berechnungen ohne Kontakt

Zur Demonstration des temporalen Konvergenzverhaltens der untersuchten Zeitintegrationsverfahren, siehe Tab. D.1, wird der zu simulierende Prozess sukzessive mit unterschiedlich konstanten Zeitschrittweiten $\Delta t_{n1} > \Delta t_{n2} > \dots > \Delta t_{n\hat{N}}$ durchlaufen. Für die Berechnung der globalen Zeitintegrationsfehler des Verschiebungs-, Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes sowie den inneren Variablen kommen die relativen Fehlermaße

$$\mathbf{err}_{\mathbf{u}} = \max_n \left(\frac{\|\mathbf{u}_n^{\text{ref}} - \mathbf{u}_n\|}{\max_n (\|\mathbf{u}_n^{\text{ref}}\|)} \right), \quad \mathbf{err}_{\mathbf{v}} = \max_n \left(\frac{\|\mathbf{v}_n^{\text{ref}} - \mathbf{v}_n\|}{\max_n (\|\mathbf{v}_n^{\text{ref}}\|)} \right), \quad (6.1)$$

$$\mathbf{err}_{\Theta} = \max_n \left(\frac{\|\Theta_n^{\text{ref}} - \Theta_n\|}{\max_n (\|\Theta_n^{\text{ref}}\|)} \right), \quad \mathbf{err}_{\mathbf{q}} = \max_n \left(\frac{\|\mathbf{q}_n^{\text{ref}} - \mathbf{q}_n\|}{\max_n (\|\mathbf{q}_n^{\text{ref}}\|)} \right) \quad (6.2)$$

zum Einsatz, wobei der Fehler für eine Primärvariable aus dem Maximum der an den diskreten Zeitpunkten t_n , $n = 0, \dots, N$, innerhalb des betrachteten Zeitintervalls $[t_0, t_e]$ gebildeten Euklidischen Norm der Strukturvektordifferenz resultiert. In Anlehnung an die Konvergenzbeweise in [Hairer et al., 1993; Strehmel et al., 2012] wird zur Auswertung der globalen Fehler das gesamte Zeitintervall einbezogen. Einige andere Autoren, siehe exemplarisch [Erlicher et al., 2002; Eidel und Kuhn, 2011; Eidel et al., 2013], werten den numerischen Zeitintegrationsfehler ausschließlich an einem einzelnen Zeitpunkt innerhalb $[t_0, t_e]$, zumeist am Ende des betrachteten Zeitintervalls, aus. Nach Meinung des Autors der vorliegenden Arbeit tritt hierdurch ein nicht zu vernachlässigender Informationsverlust auf, welcher keine neutrale Beurteilung des Zeitintegrationsverfahrens gestattet. Aus diesem Grund findet solch Auswertungskonzept in der vorliegenden Arbeit keine Anwendung.

Zur Entdimensionierung der Fehlermaße wird die maximale Differenz auf die innerhalb $t_n \in [t_0, t_e]$ auftretende maximale Euklidische Norm eines Referenzvektors bezogen. Die Generierung der Referenzvektoren $\mathbf{u}^{\text{ref}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, $\mathbf{v}^{\text{ref}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uv}}}$, $\Theta^{\text{ref}} \in \mathbb{R}^{n_{\Theta}}$ und $\mathbf{q}^{\text{ref}} \in \mathbb{R}^{n_{\mathbf{q}}}$ kann einerseits mit einem analytischen Ausdruck oder einer hochgenauen numerischen Referenzlösung erfolgen.² Um ein Ordnungsdiagramm in Bezug auf einen der in Gl. (6.1) und (6.2) definierten Fehlermaße zu erstellen, wird der skalare Fehler in einem doppelt-logarithmischen Diagramm auf die Ordinate und die Zeitschrittweite auf die Abszisse aufgetragen, siehe exemplarisch Abb. 6.2a und 6.2b. Aus den Steigungen der dargestellten Verläufe ergeben sich die erreichten Konvergenz- bzw. Konsistenzordnungen der Integratoren. Die schwarzen Strichlinien in den Abbildungen kennzeichnen die theoretisch zu erreichende temporale Ordnung der Verfahren. Wie zuvor in Abschnitt 5.2.5 erläutert, stimmen für die in der vorliegenden Arbeit angewendeten Einschrittverfahren die theoretische Konvergenz- und Konsistenzordnung überein. Zum Zweck einer abwechslungsreicheren Ausdrucksweise wird daher im Folgenden auf eine exakte mathematische Unterscheidung der beiden Termini verzichtet.

Den Einstieg in die Analyse der Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung vom Runge-Kutta-Typ und der Generalized- α Methode bilden die nachfolgenden Untersuchungen im

²Zur Bestimmung einer hochgenauen numerischen Referenzlösung sollte nach Möglichkeit der Integrator mit dem geringsten Fehler in Kombination mit einer vom numerischen Aufwand her noch vertretbaren minimalen Schrittweite $\Delta t_{n \min}$, $\Delta t_{n \min} < \Delta t_{n\hat{N}}$, gewählt werden.

Bereich der Dynamik. Nach Durchführung entsprechender Fehleranalysen im Zeitbereich wird die Applizierbarkeit von fehlerbasierten Strategien zur adaptiven Zeitschrittsteuerung für die behandelten Klassen von Einschrittverfahren geprüft. Das im nächsten Abschnitt analysierte Beispiel eines linearen Einfreiheitsgradsystems eignet sich hervorragend, um erste grundlegende Merkmale und Charakteristiken der Integratoren im Bereich der Dynamik aufzuzeigen.

6.1.1 Lineares Einfreiheitsgradsystem

Das Anfangswertproblem des in Abbildung 6.1 visualisierten linear-elastischen Einfrei-

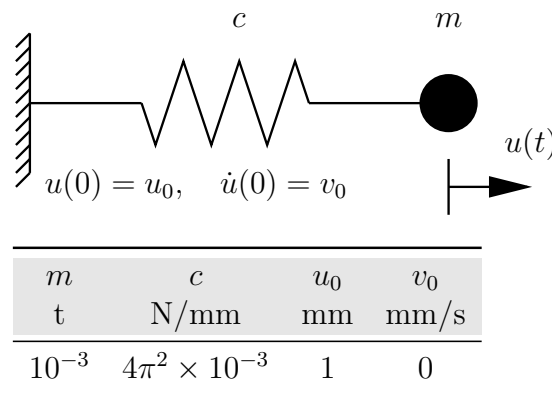


Abbildung 6.1: Berechnungsmodell des Einfreiheitsgradsystem

heitsgradsystem (SDOF-System) ohne äußere Anregung ist definiert als

$$m\ddot{u}(t) + cu(t) = 0 \quad \text{bzw.} \quad \ddot{u}(t) + \omega_0^2 u(t) = 0, \quad (6.3)$$

$$u(0) = u_0, \quad \dot{u}(0) = v_0, \quad t \in [0 \text{ s}, 1 \text{ s}].$$

Die Eigenkreisfrequenz ω_0 des ungedämpften SDOF-Systems mit der Masse m und der konstanten Federsteifigkeit c ergibt sich zu $\omega_0 = \sqrt{c/m} = 2\pi \text{ s}^{-1}$. Anhand der allgemeinen aus Gl. (6.3) abgeleiteten analytischen Lösung dieses trivialen Systems

$$u(t) = u_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{v_0}{\omega_0} \sin(\omega_0 t) \quad (6.4)$$

werden temporale Konvergenzordnungsuntersuchungen für die in Tab. D.1 angegebenen Zeitintegrationsverfahren mit den konstanten Zeitschrittweiten $\Delta t_{n1} = 10^{-1} \text{ s}$, $\Delta t_{n2} = 10^{-2} \text{ s}$, $\Delta t_{n3} = 10^{-3} \text{ s}$, $\Delta t_{n4} = 10^{-4} \text{ s}$ durchgeführt. Nach Durchlaufen der in Abschnitt 6.1 beschriebenen Auswertungsprozedur offenbaren die in den Abbildungen 6.2a und 6.2b dargestellten Ordnungsuntersuchungen, dass alle Verfahren ihre theoretische Konvergenzordnung erreichen. Die Gültigkeit dieser Aussage kann anhand der Parallelität der Kurvenverläufe mit den schwarz gestrichelten Linien, welche die theoretisch zu erreichende temporale Ordnung der Verfahren kennzeichnen, verifiziert werden.

Für den harmonischen Oszillator aus Abbildung 6.1 ist es nützlich neben dem Nachweis der Konsistenzordnung der Verfahren auch andere charakteristischen Merkmale einzubeziehen, die die Genauigkeits- und Stabilitätseigenschaften der Algorithmen erfassen.

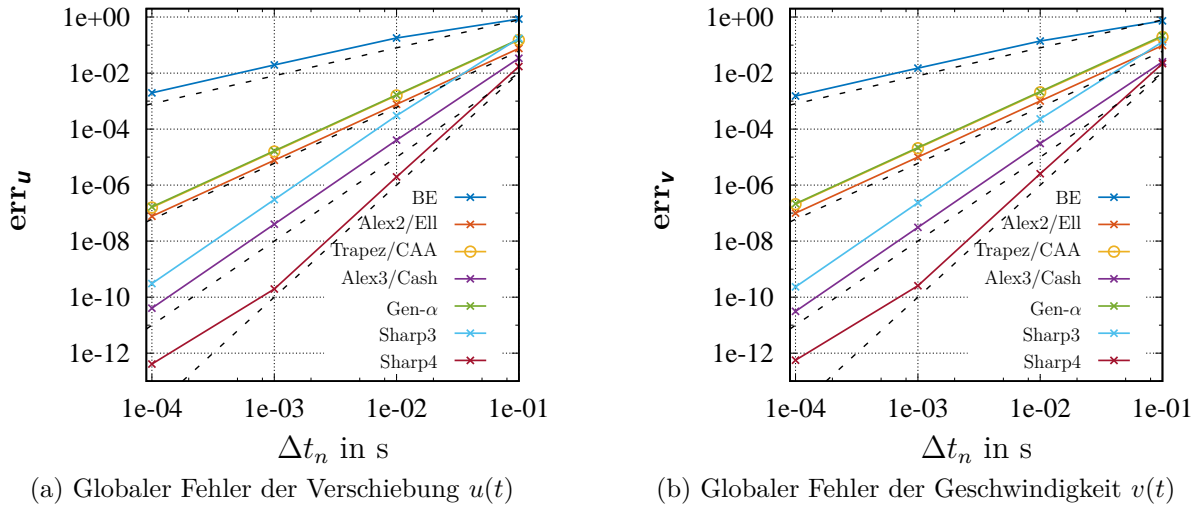


Abbildung 6.2: Ordnungsdiagramme für linear-elastisches Einfreiheitsgradsystem - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_v aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

Die abzuleitenden Größen beruhen dabei auf dem Kriterium der spektralen Stabilität, welches bei linearem Strukturverhalten Anwendung findet. Exemplarisch für die Analyse der spektralen Stabilität von Zeitintegrationsverfahren seien z. B. die Arbeiten von Bathe und Wilson [1972], Goudreau und Taylor [1973], Hilber et al. [1977], Wood et al. [1980], Adams und Wood [1983], Hughes [1983], Hughes [2000], Simo et al. [1992] und Bathe [2002] erwähnt. Hierbei reicht es aus, die homogene Bewegungsgleichung (6.3) ohne äußere Anregung zu betrachten.

Die Anwendung von Einschrittverfahren zur Zeitdiskretisierung des linearen Anfangswertproblems (6.3) führt auf ein lineares Gleichungssystem der Gestalt

$$\mathbf{y}_{n+1} := \begin{Bmatrix} u_{n+1} \\ v_{n+1} \end{Bmatrix} = \mathbf{A}_V \mathbf{y}_n = \begin{bmatrix} A_{V11} & A_{V12} \\ A_{V21} & A_{V22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_n \\ v_n \end{Bmatrix}, \quad (6.5)$$

mit der Verstärkungsmatrix $\mathbf{A}_V \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. Der lineare Abbildungsoperator \mathbf{A}_V ist vom Zeitschritt Δt_n , der algorithmischen Parametrisierung des zugrunde liegenden Einschrittverfahrens sowie von der Eigenkreisfrequenz ω_0 abhängig. Im Rahmen der spektralen Stabilitätsanalyse leiten sich die Kenngrößen aus den zwei Eigenwerten $\lambda_{V1,2}$ von \mathbf{A}_V ab, welche im Allgemeinen komplexe Zahlen sind.³ Ihre Bestimmung erfolgt mit Hilfe des \mathbf{A}_V zugeordneten charakteristischen Polynoms

$$\det(\mathbf{A}_V - \lambda_V \mathbf{I}) = \lambda_V^2 - 2\mathbf{I}_{\mathbf{A}_V} \lambda_V + \mathbf{II}_{\mathbf{A}_V} = 0 \quad (6.6)$$

und den Invarianten $\mathbf{I}_{\mathbf{A}_V} = 1/2 \operatorname{tr} \mathbf{A}_V$, $\mathbf{II}_{\mathbf{A}_V} = \det \mathbf{A}_V$. Das Resultat der Gleichung (6.6)

³Komplexe Zahlen $z = a + ib$ können in einer kartesischen Darstellung mit dem Realteil $\operatorname{Re}(z) = a$ und Imaginärteil $\operatorname{Im}(z) = b$ oder in Exponentialdarstellung $z = re^{i\varphi} = r(\cos \varphi + i \sin \varphi)$ mit den Polarkoordinaten r und φ formuliert werden. Die imaginäre Einheit wird durch i gekennzeichnet, einer Zahl mit der Eigenschaft $i^2 = -1$.

lautet

$$\lambda_{V,2} = I_{\mathbf{A}_V} \pm \sqrt{I_{\mathbf{A}_V}^2 - II_{\mathbf{A}_V}}. \quad (6.7)$$

Der maximale Eigenwert von \mathbf{A}_V definiert den sogenannten Spektralradius

$$\rho_V(\mathbf{A}_V) = \max(|\lambda_{V,2}|), \quad (6.8)$$

wobei $|\lambda_{V,i}| = \sqrt{\lambda_{V,i} \bar{\lambda}_{V,i}}$, $i = 1, 2$, den Betrag einer komplexen Zahl kennzeichnet.⁴ Ein Integrator ist unbedingt stabil wenn die mit einem beliebigen Zeitschritt Δt_n ermittelte numerische Lösung nicht über alle Grenzen anwächst. Für lineare Probleme der Dynamik wird dieser Sachverhalt mathematisch durch die Bedingung

$$\rho_V(\mathbf{A}_V) \leq 1 \quad \forall \quad \Delta t_n \in [0, \infty] \quad (6.9)$$

reflektiert. Zeitintegrationsverfahren, die Gl. (6.9) genügen, werden dann als unbedingt spektral stabil bezeichnet. Neben der Eigenschaft als Stabilitätsindikator ist der Spektralradius $\rho_V(\mathbf{A}_V)$ auch ein Maß für die numerische Dissipation. Die numerische Dissipation beschreibt den Amplitudenfehler im Verlauf der Zeitintegration, wobei ein kleiner Spektralradiuswert eine hohe numerische Dämpfung, bis hin zu vollständiger Annihilation bei $\rho_V = 0$, und $\rho_V = 1$ den nicht algorithmisch gedämpften Fall, kennzeichnet. Abbildung 6.3a veranschaulicht für die zu analysierenden Einschrittverfahren

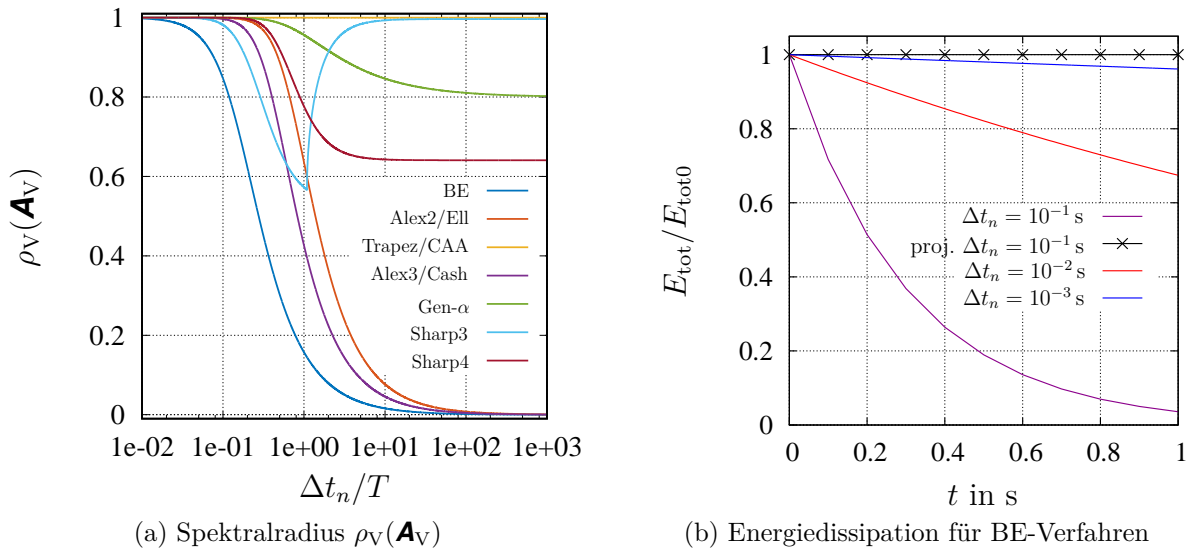


Abbildung 6.3: Spektralradius $\rho_V(\mathbf{A}_V)$ aufgetragen über einer relativen Zeitschrittweite $\Delta t_n/T$ für verschiedene Einschrittverfahren (linke Abb.) und Verletzung der Energieerhaltung (rechte Abb.)

den Spektralradius $\rho_V(\mathbf{A}_V)$, aufgetragen über den auf die Periodendauer $T = 2\pi/\omega_0$ des harmonischen Oszillators bezogenen Zeitschritt Δt_n . Wie Hughes [2000, S. 512–513]

⁴Ein Balken über der komplexen Zahl $z = a + ib$ symbolisiert die zugehörige komplex Konjugierte $\bar{z} = a - ib$.

zeigt, konserviert die Trapezregel a priori die totale Energie E_{tot} des Systems, sodass in Übereinstimmung mit Abb. 6.3a der Spektralradius des Verfahrens den konstanten Wert $\rho_V(\mathbf{A}_V) = 1$ annimmt. Dies impliziert, dass Systemantworten von niederfrequenten Moden ohne Amplitudenfehler wiedergegeben werden, jedoch können unerwünschte künstlich erzeugte Moden im Hochfrequenzbereich, die als Artefakt einer unsachgemäßen Raumdiskretisierung in Erscheinung treten, auch nicht herausgedämpft werden. Unter den Vertretern der numerisch dissipativen Einschrittverfahren besitzt die Generalized- α Methode den weichsten Übergang, welcher in der zur Beschreibung des algorithmischen Parametersatzes (5.152) verwendeten Kenngröße $\rho_\infty = \lim_{\Delta t_n/T \rightarrow \infty} \rho_V(\mathbf{A}_V) = 0.8$ mündet, siehe Abschnitt 5.2.4. Die Forderung nach einer optimalen Einstellung der algorithmischen Dämpfung drückt sich in dem dargestellten Verlauf für $\rho_V(\mathbf{A}_V)$ aus. Die Runge-Kutta Methoden, allen voran das implizite Euler-Verfahren (BE), sind in Bezug auf die numerischen Dämpfungseigenschaften der Generalized- α Methode unterlegen. Aufgrund der den SDIRK-Verfahren BE, Alex2/Ell und Alex3/Cash zugesprochenen L-Stabilität⁵ strebt der Spektralradius $\rho_V(\mathbf{A}_V)$ für $\Delta t_n/T \rightarrow \infty$ asymptotisch gegen Null, wodurch ein stark beschleunigtes transientes Abklingverhalten initiiert wird. Obwohl der Alex3/Cash-Integrator ($p = 3$) im Vergleich zur Alex2/Ell-Methode ($p = 2$) eine höhere Konsistenzordnung und geringere Fehlerkonstante besitzt, ist im Hinblick auf Abb. 6.3a das Verfahren dritter Ordnung gegenüber der Alex2/Ell-Methode im Nachteil. Identische Tendenzen für SDIRK-Verfahren wurden bereits von Owren und Simonsen [1995] dokumentiert. Die numerisch dissipativen Vertreter aus der DIRKN-Klasse zeigen ein verschiedenartiges Verhalten. Während die Sharp4-Methode aus der Gesamtheit der untersuchten Runge-Kutta Verfahren über den optimiertesten Verlauf des Spektralradius verfügt, weist die Sharp3-Methode einen Verzweigungspunkt im Kurvenverlauf auf. Diese Gabelung bewirkt, dass die künstlich erzeugten höherfrequenten Moden einer Struktur keinerlei numerische Dämpfung erfahren.

Wie Hughes [1983, S. 98–101] zeigt, nehmen die komplexen Eigenwerte $\lambda_{V1,2}$ die Gestalt

$$\lambda_{V1,2} = e^{\bar{\omega}_0 \Delta t_n (-\bar{\xi} \pm i)} \quad (6.10)$$

an, wobei $\bar{\omega}_0$ einer algorithmischen Eigenkreisfrequenz des ungedämpften Einfreiheitsgradsystems und $\bar{\xi}$ einem dimensionslosen, algorithmischen Dämpfungsmaß entspricht. Zur Interpretation dieser Größen wird das zur analytischen Lösung (6.4) diskrete Analogon

$$\begin{aligned} u_n &= e^{-\bar{\xi} \bar{\omega}_0 t_n} (C_1 \cos(\bar{\omega}_0 t_n) + C_2 \sin(\bar{\omega}_0 t_n)), \quad \text{mit} \\ C_1 &= u_0 \quad \text{und} \quad C_2 = \frac{\frac{1}{2}(A_{V11} - A_{V22})u_0 + A_{V12}v_0}{\sqrt{\Pi_{\mathbf{A}_V} - \Gamma_{\mathbf{A}_V}^2}}, \end{aligned} \quad (6.11)$$

eingeführt.⁶ Die Analyse von Gl. (6.11) offenbart, dass numerische Dämpfung, ausgedrückt durch das algorithmische Dämpfungsmaß $\bar{\xi}$, sowie numerisch bedingte Dispersion

⁵In Bezug auf die Stabilitätstheorie von Integrationsverfahren und deren Klassifizierung sei auf [Strehmel et al., 2012] verwiesen.

⁶Aus der Überführung der linearen Abbildung (6.5) in ein entsprechendes Mehrschrittverfahren folgt $u_{n+1} - 2\Gamma_{\mathbf{A}_V} u_n + \Pi_{\mathbf{A}_V} u_{n-1} = 0$. Hierbei wird angenommen, dass bei der Berechnung der diskreten Lösung u_n , siehe Gl. (6.11), zum Zeitpunkt $t_n = n\Delta t_n$ ein konstanter Zeitschritt Δt_n Verwendung

infolge einer von ω_0 abweichenden algorithmischen Eigenkreisfrequenz $\bar{\omega}_0$ und ein Phasenwinkelversatz zu den in den Konvergenzuntersuchungen in Abbildung 6.2 dargestellten Zeitintegrationsfehlern führen. Die alternativen Kenngrößen $\bar{\xi}$ und $\bar{\omega}_0$ lassen sich durch die folgenden Ausdrücke

$$\frac{\mathbf{I}_{\mathbf{A}_V}}{\sqrt{\Pi_{\mathbf{A}_V}}} = \frac{\frac{1}{2}(\lambda_{V_1} + \lambda_{V_2})}{\sqrt{\lambda_{V_1}\lambda_{V_2}}} = \cos(\bar{\omega}_0 \Delta t_n) \quad \Rightarrow \quad \bar{\omega}_0 = \frac{1}{\Delta t_n} \arccos\left(\frac{\mathbf{I}_{\mathbf{A}_V}}{\sqrt{\Pi_{\mathbf{A}_V}}}\right), \quad (6.12)$$

$$\Pi_{\mathbf{A}_V} = \lambda_{V_1}\lambda_{V_2} = e^{-2\bar{\xi}\bar{\omega}_0\Delta t_n} \quad \Rightarrow \quad \bar{\xi} = -\frac{\ln(\Pi_{\mathbf{A}_V})}{2\bar{\omega}_0\Delta t_n} \quad (6.13)$$

berechnen. Eine detaillierte Herleitung zu den angegebenen Ausdrücken ist in [Hughes, 1983; Hughes, 2000] zu finden.⁷ Als Maß für numerische Dissipation und Dispersion sind in Abb. 6.4 das algorithmische Dämpfungsmaß $\bar{\xi}$ und der relative Periodendauerfehler $(\bar{T} - T)/T$, mit $\bar{T} = 2\pi/\bar{\omega}_0$, über $\Delta t_n/T$ dargestellt. Die Analyse des algorithmischen

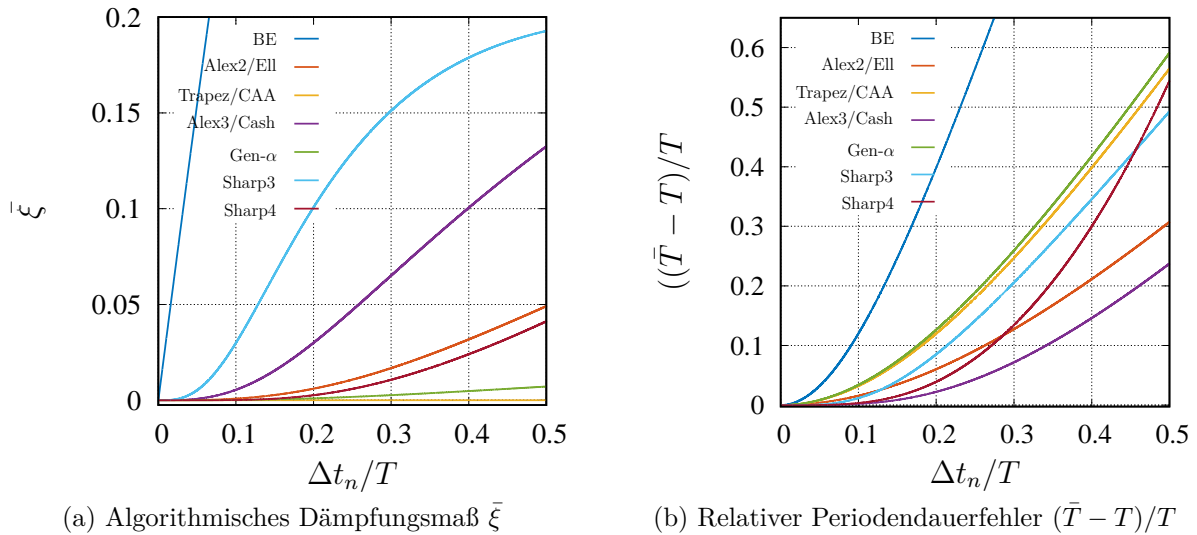


Abbildung 6.4: Algorithmisches Dämpfungsmaß $\bar{\xi}$ und relativer Periodendauerfehler $(\bar{T} - T)/T$ aufgetragen über einer relativen Zeitschrittweite $\Delta t_n/T$ für verschiedene Einschrittverfahren

Dämpfungsmaß $\bar{\xi}$ in Abb. 6.4a offenbart identische Tendenzen wie die Betrachtung des

findet. Für den allgemeineren Fall von verschiedenen Eigenwerten $\lambda_{V_1} \neq \lambda_{V_2}$ lässt sich die Lösung der Differenzgleichung als $u_n = K_1(\lambda_{V_1})^n + K_2(\lambda_{V_2})^n$ angeben. Die Parameter K_1 und K_2 werden mit Hilfe der Anfangsbedingungen u_0 und v_0 bestimmt. Die Substitution von $\lambda_{V_{1,2}}$ in die allgemeine Lösung der Differenzgleichung und die Ausnutzung der Beziehungen $\mathbf{I}_{\mathbf{A}_V} = 1/2(\lambda_{V_1} + \lambda_{V_2}) = e^{-\bar{\xi}\bar{\omega}_0\Delta t_n} \cos(\bar{\omega}_0\Delta t_n)$ sowie $\Pi_{\mathbf{A}_V} = \lambda_{V_1}\lambda_{V_2} = e^{-2\bar{\xi}\bar{\omega}_0\Delta t_n}$ führen auf das Resultat in Gl. (6.11).

⁷In [Hilber et al., 1977] und [Chung und Hulbert, 1993] wird die Beschleunigung als dritte Gleichung in die lineare Abbildung aus Gl. (6.5) einbezogen, sodass die Stabilitätsuntersuchungen mit einer Verstärkungsmatrix der Gestalt $\mathbf{A}_V \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ durchgeführt werden. Es resultieren nun drei Eigenwerte, die in Haupteigenwerte $\lambda_{V_{1,2}}$, welche maßgeblich die Stabilitätseigenschaften bestimmen, und einen Scheineigenwert λ_{V_3} klassifiziert werden können. Die Bestimmung der Kenngrößen ρ_V , $\bar{\omega}_0$ und $\bar{\xi}$ verläuft jedoch ganz analog zu der geschilderten Vorgehensweise.

Spektralradius in Abb. 6.3a. Der einhergehende Amplitudenfehler unter den numerisch dissipativen Verfahren, d. h. aller untersuchten Einschrittverfahren außer der Trapezregel, fällt bei der Generalized- α Methode am geringsten aus, wohingegen der BE-Integrator ein sehr ausgeprägtes transientes Abklingverhalten offenbart. Wie exemplarisch von Hughes [2000] anhand der Newmark-Familie dargelegt, weisen alle Verfahren höherer Ordnung $p \geq 2$ im Ursprung $\Delta t_n/T = 0$ einen charakteristischen Nullanstieg auf. Der positive Anstieg des impliziten Euler-Verfahrens in $\Delta t_n/T = 0$ ist ein Indikator für die dem Algorithmus zugeordnete Konsistenzordnung $p = 1$ und resultiert aus der Präsenz eines linearen Summandenterms in Gl. (6.13), sodass der Kurvenverlauf für $\bar{\xi}$ in dem anwendungsorientierten Bereich $0 \leq \Delta t_n/T \leq 0.1$ in hervorragender Näherung durch eine Gerade beschrieben werden kann. Die Betrachtung des relativen Periodendauerfehlers in Abb. 6.4b enthüllt, dass abgesehen vom impliziten Euler-Verfahren die Integratoren der RK-Verfahrensklasse von höherer Ordnung hier beträchtliche Vorteile gegenüber der Generalized- α Methode besitzen.⁸ Darüber hinaus neigen alle Zeitintegrationsverfahren dazu die Perioden der numerischen Systemantwort zu verlängern. Das von Dahlquist [1963] formulierte Theorem, die sogenannte zweite Dahlquist-Schranke, sagt aus, dass ein A-stabiles lineares Mehrschrittverfahren höchsten die Konsistenzordnung $p = 2$ besitzt und die Trapezregel⁹ von allen A-stabilen Mehrschrittverfahren zweiter Ordnung die kleinste Fehlerkonstante aufweist. Basierend auf dieser fundamentalen Aussage der numerischen Mathematik kann die Trapezregel als optimale Referenz zum Vergleich mit anderen Integratoren herangezogen werden. Aus den Abb. 6.2a, 6.2b und 6.4b ist zu entnehmen, dass die RK-Verfahren höherer Ordnung Alex2/Ell, Alex3/Cash, Sharp3 und Sharp4 gegenüber der Trapezregel kleinere Fehler induzieren.

Bei genauerer Analyse der betrachteten numerisch dissipativen RK-Zeitdiskretisierungsverfahren und der Generalized- α Methode ist herauszustellen, dass die resultierenden numerischen Lösungen für konservative, mechanische Systeme nicht alle relevanten Größen wie Impuls, Drehimpuls und Energie erhalten. In Abbildung 6.3b ist für den oben behandelten Einmassenschwinger aus Abb. 6.1 die Abnahme der totalen mechanischen Energie $E_{\text{tot}} = 1/2(m\dot{u}^2 + cu^2)$, bezogen auf die Anfangsenergie $E_{\text{tot}0} = 1/2(mv_0^2 + cu_0^2)$, über der Zeit unter Verwendung des impliziten Euler-Verfahrens (BE) dargestellt. Obwohl nicht im Fokus dieser Arbeit soll ein kurzer Ausblick auf so genannte energie- und impulserhaltenden Zeitintegrationsverfahren Erwähnung finden, welche bereits bei der Konstruktion des Verfahrens versuchen, die oben genannten Größen zu erhalten. Stellvertretend auf dem Gebiet seien die Arbeiten von Simo und Wong [1991], Simo und Tarnow [1992], Simo et al. [1992], Tarnow [1993], Lewis und Simo [1994], Kuhl und Crisfield [1999], Kuhl und Ramm [1999], Kuhl und Ramm [2000], Gonzalez [2000], Betsch und Steinmann [2001], Groß [2004] und Groß und Betsch [2011] erwähnt. Eine andere Art der Stabilisierung ist die Kombination zusätzlicher Nebenbedingungen in Gestalt der algorithmischen Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung mit den zeitdiskretisierten Bewegungsgleichungen. Der grundlegenden Idee von Hughes et al. [1978] folgend entwickelten hieraus Kuhl und Ramm [1996] den sogenannten „Constraint Energy Momentum

⁸In Chung und Hulbert [1993] wird die Aussage getroffen, dass die Trapez/CAA-Methode unter allen Derivaten der Generalized- α Methode den Periodendauerfehler minimiert.

⁹Die Trapezregel kann ebenfalls in Gestalt eines linearen Mehrschrittverfahren dargestellt werden, siehe hierzu [Hughes, 2000].

Algorithmus“. Eine umfassende Darstellung dieses Algorithmus ist in [Kuhl, 1996] zu finden. Der in der vorliegenden Arbeit alternativ vorgeschlagene Weg verwendet eine nach dem Zeitintegrationsschritt nachgeschaltete Projektionsmethode, welche die Energieerhaltung als algebraischen Zwang einbezieht. Die Berücksichtigung weiterer Zwangsbedingungen, wie Impuls- und Drehimpulserhaltung, ist möglich, wird jedoch im Rahmen der Arbeit nicht weiter verfolgt. Das Konzept, welches ursprünglich aus dem Bereich der geometrisch numerischen Integration stammt, wurde bereits in [Hartmann et al., 2008a] bei der Behandlung von plastischer Inkompressibilität erfolgreich angewendet. Der vollständige Algorithmus für die Projektionsmethode, welcher den Ausführungen in [Hairer et al., 2002] folgt, wird in Anhang D.4 beschrieben. Die für eine Entdimensionierung erforderlichen Parameter \hat{u}_{dim} und \hat{v}_{dim} werden für das betrachtete Beispiel als $\hat{u}_{\text{dim}} = 1 \text{ mm}$ und $\hat{v}_{\text{dim}} = 1 \text{ mm s}^{-1}$ festgelegt. Neben den dissipativen Kurvenverläufen in Abb. 6.3b

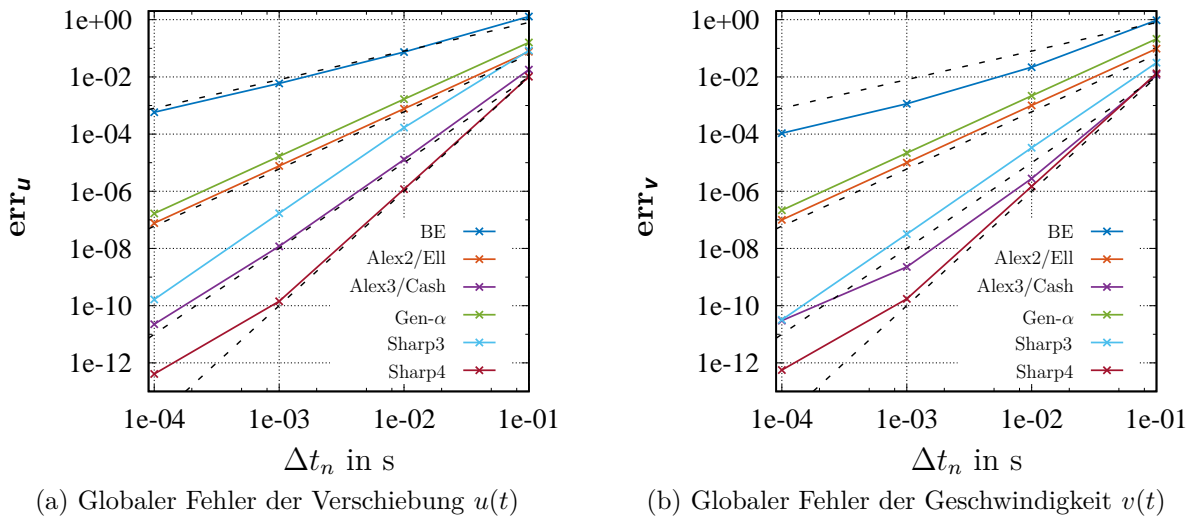


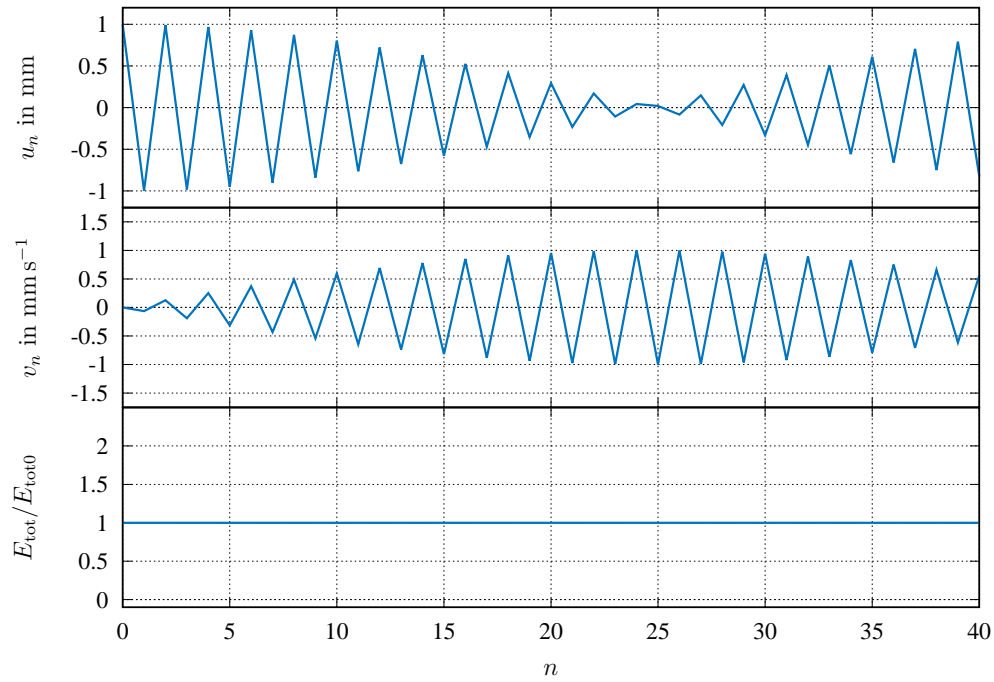
Abbildung 6.5: Ordnungsdiagramme für linear-elastisches Einfreiheitsgradsystem mit Projektion - Globale Zeitintegrationsfehler err_u und err_v aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

ist auch eine Berechnung mit Projektionsmethode (schwarzer Kurvenverlauf: implizites Euler-Verfahren (BE) mit Projektion und $\Delta t_n = 10^{-1} \text{ s}$) dargestellt, welche nun die Energie E_{tot} erhält. Aus den temporalen Ordnungsuntersuchungen in Abbildung 6.5 lässt sich weiterhin schlussfolgern, dass die Konvergenzordnungen durch die nachgeschaltete Projektionsmethode nicht zerstört werden. Shampine [1999] und Hairer et al. [2002] zeigen, dass der infolge der Projektion resultierende Fehler in der Größenordnung des lokalen Integrationsfehler $\|\delta\| \approx \mathcal{O}(\Delta t_n^{p+1})$ liegt. Der positive Einfluss der angewendeten Prozedur wird am deutlichsten für das implizite Euler-Verfahren. Bei allen anderen Integratoren höherer Ordnung kann der Fehler nicht weiter signifikant verkleinert werden. Jedoch ist zu erwarten, dass derart modifizierte Zeitintegrationsverfahren, welche Nebenbedingungen bzw. Symmetrien des analytischen Problems erfüllen, in einer vergleichbaren Qualität wie die in Abschnitt 5.2 erwähnten strukturerhaltenden Integratoren zu einer verbesserten Langzeitstabilität beitragen.

Overshooting: Ein andere in der Literatur zur Strukturodynamik weitreichend diskutierte Charakteristik diverser numerischer Zeitintegrationsschemata ist das unerwünschte Phänomen des Überschwingens, dem sogenannten aus dem Englischen abgeleiteten „Overshoot“, siehe u. a. [Goudreau und Taylor, 1973; Hilber und Hughes, 1978; Adams und Wood, 1983; Hughes, 2000; Erlicher et al., 2002]. Dieses markante Merkmal eines Integrators bezeichnet die numerische Verstärkung unechter, hochfrequenter Störmoden der Strukturantwort während der ersten Zeitschritte und ist unabhängig von der algorithmischen Stabilität des Verfahrens. Zum Nachweis der Overshoot-Affinität wird die im Bereich der Dynamik häufig anzutreffende skalare Testgleichung (6.3)₂ zweiter Ordnung mit $\omega_0 = 1 \text{ s}^{-1}$ herangezogen. Des Weiteren sollen die Anfangsbedingungen $u(0) = u_0 = 1 \text{ mm}$ und $\dot{u}(0) = v_0 = 0 \text{ mm s}^{-1}$ sowie ein Zeitschritt $\Delta t_n = 20\pi \text{ s}$, der somit ein hochfrequentes Verhältnis von $\Delta t_n/T = 10$ nachbildet, die kritische Überschwingbedingung $u_n > u_{\max}$ bzw. $v_n > v_{\max}$, mit $u_{\max} = \max(u(t)) = 1 \text{ mm}$ und $v_{\max} = \max(v(t)) = 1 \text{ mm s}^{-1}$, reproduzieren.¹⁰ In der Abb. 6.6 sind die numerischen Resultate für die untersuchten Zeitintegrationsverfahren veranschaulicht, wobei die Newmark- β Methode (N- β : $\gamma = 0.6$, $\beta = 0.3025$), das Hilber-Hughes-Taylor Verfahren (HHT- α : $\alpha_{\text{HHT}} = 0.1$) sowie die Trapez/CAA (Trapez/CAA) bereits in [Hilber und Hughes, 1978] behandelt worden und als Richtwert dienen. Die Darstellung der zugehörigen Energieverläufe unterstützen die nachfolgend getroffenen Aussagen.

Die nicht numerisch dissipative Trapezregel in Abb. 6.6a erfährt keinerlei Überschwingen, weder in der diskontinuierlichen Sequenz der Verschiebung u_n noch in der Geschwindigkeit v_n . Aus der synchronisierten Zu- und Abnahme in u_n und v_n lässt sich die diskrete Energieerhaltung schlussfolgern. Abb. 6.6b offenbart milde Overshoot-Charakteristiken in der Geschwindigkeit für die Generalized- α Methode (Gen- α : $\rho_\infty = 0.8$) und deren Derivate (N- β , HHT- α). Das Aufblähen der totalen mechanischen Energie in den ersten Zeitschritten ist ein zusätzlicher Indikator hierfür. Im Gegensatz zu den in dieser Arbeit nicht behandelten Kollokationsmethoden, siehe z. B. [Hilber, 1976; Hilber und Hughes, 1978], und der Wilson- θ Methode, siehe [Wilson, 1968], bei denen sich ein drastisches Überschwingverhalten in der Verschiebung manifestiert, bleibt die Familie der Generalized- α Methoden hiervon verschont. Eine detailliertere Analyse dieser Methoden ist in [Hilber et al., 1977; Hulbert und Hughes, 1987; Chung und Hulbert, 1993; Kuhl, 1996; Erlicher et al., 2002] zu finden. Bezugnehmend auf die DIRK-Verfahren (BE, Alex2/Ell, Alex3/Cash), siehe Abb. 6.6c, ist infolge der ausgeprägten Annihilation, bei der innerhalb des ersten Zeitschritts jegliche von Null verschiedene Schwingungsantwort nahezu vollständig herausgedämpft wird, ein Überschwingen ausgeschlossen. Wie bereits zuvor in Abb. 6.3a bei der Analyse des Spektralradius ersichtlich war, reagieren die direkten DIRKN-Verfahren (Sharp3, Sharp4) in Abb. 6.6d etwas nachgiebiger in der Verschiebungs- und Geschwindigkeitsantwort. Darüber hinaus zeigt der Sharp4-Integrator ein leichtes Überschwingen in u_n .

¹⁰Für $\Delta t_n/T \rightarrow 0$ tritt kein Overshoot-Phänomen auf, da es sich bei den in dieser Arbeit eingesetzten impliziten unbedingt stabilen Verfahren um konvergente Schemata handelt, siehe die durchgeführten Ordnungsuntersuchungen 6.2.



(a) Trapezregel (Trapez/CAA)

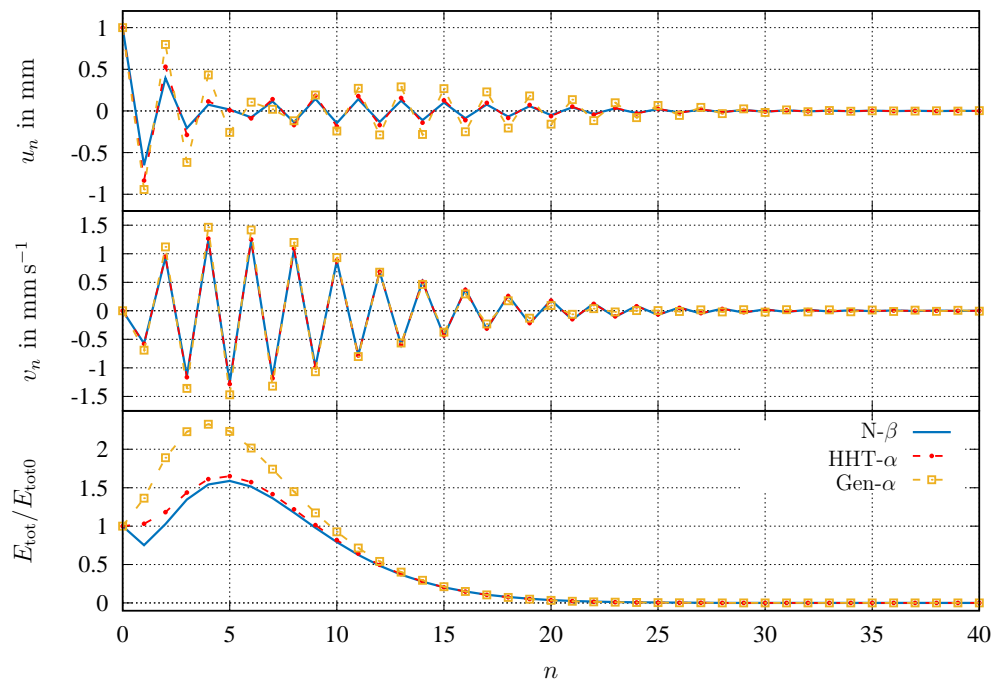
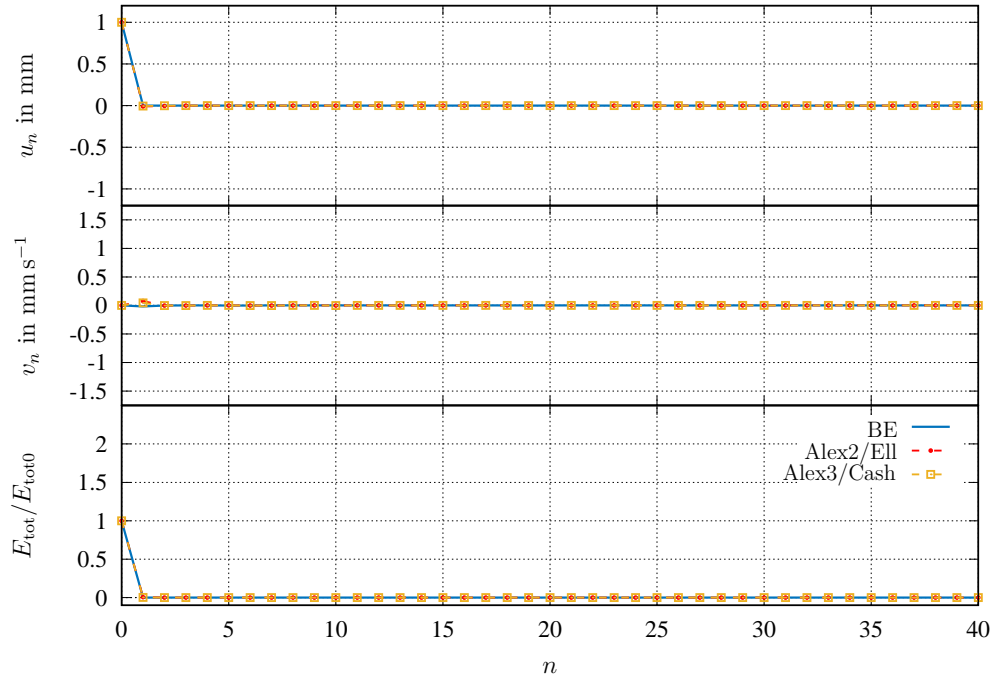
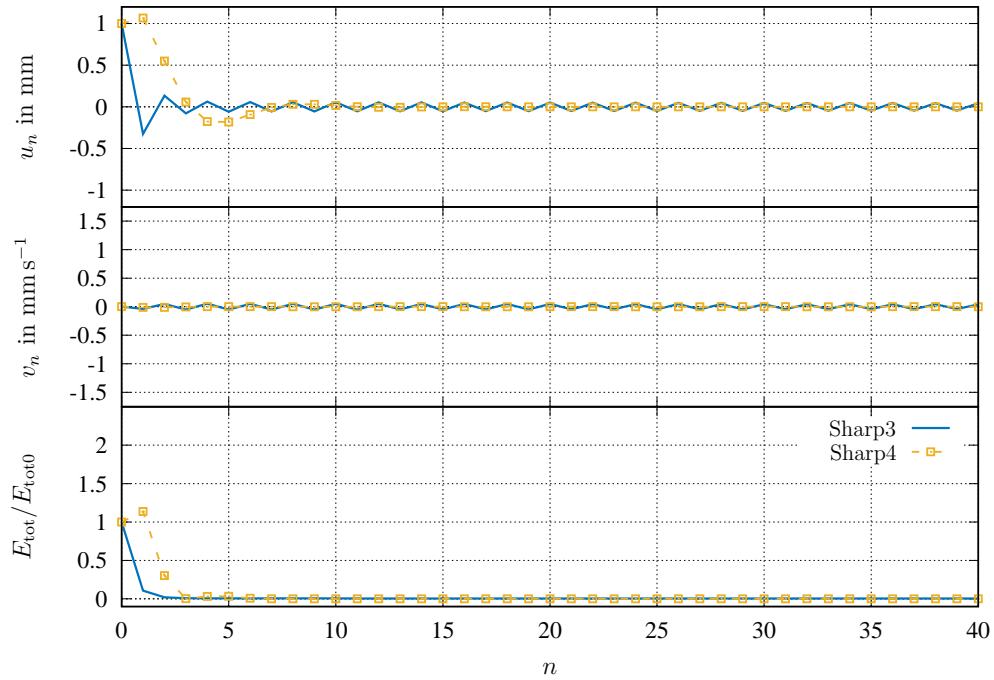

 (b) Newmark-Verfahren (N- β : $\gamma = 0.6$, $\beta = 0.3025$), Hilber-Hughes-Taylor Verfahren (HHT- α : $\alpha_{\text{HHT}} = 0.1$), Generalized- α Methode (Gen- α : $\rho_{\infty} = 0.8$)

Abbildung 6.6: Gegenüberstellung des Überschwingungsverhalten verschiedener Einzschrittverfahren mit $\Delta t_n/T = 10$ in der Verschiebungs- und Geschwindigkeitsantwort sowie für den Energieverlauf des linear-elastischen Einfreiheitsgradsystem, aufgetragen über dem Zeitinkrementindex n



(c) Implizites Euler-Verfahren (BE), Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell), Alexander/Cash (Alex3/Cash)

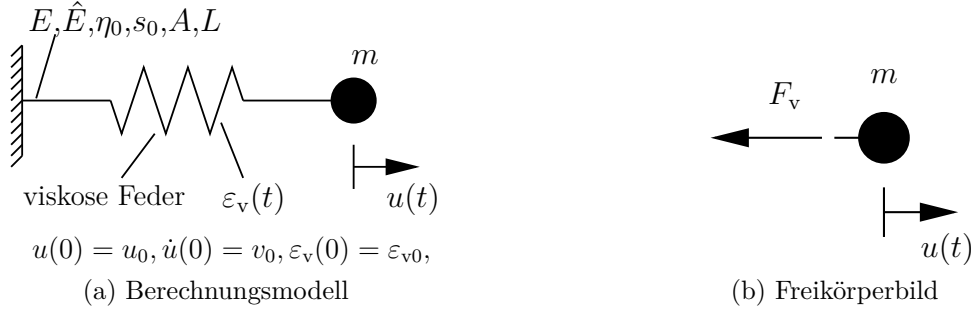


(d) Sharp/Fine (3), Sharp/Fine (4)

Abbildung 6.6: Fortsetzung: Gegenüberstellung des Überschwingungsverhalten verschiedener Einschrittverfahren mit $\Delta t_n/T = 10$ in der Verschiebungs- und Geschwindigkeitsantwort sowie für den Energieverlauf des linear-elastischen Einfreiheitsgradsystem, aufgetragen über dem Zeitinkrementindex n

6.1.2 Nichtlineares Einfeldsystem

Für das zu behandelnde viskoelastische Einfeldsystem aus Abb. 6.7 liegt folgendes



m t	E N/mm ²	\hat{E} N/mm ²	η_0 Ns/mm ²	s_0 MPa ⁻¹	A mm ²	L mm	u_0 mm	v_0 mm/s	ε_{v0} -
10^{-3}	$4\pi^2 \times 10^{-6}$	$4\pi^2 \times 10^{-6}$	1.3×10^{-6}	1.1	10^6	10^3	1	0	10^{-3}

Abbildung 6.7: Berechnungsmodell des nichtlinear-viskoelastischen Einfeldsystems

Anfangswertproblem aus dem Bereich der nichtlinearen Strukturdynamik zu Grunde:

$$\left\{ \begin{array}{l} m\ddot{u}(t) + F_v(\varepsilon(u(t)), \varepsilon_v(t)) \\ \dot{\varepsilon}_v(t) + \frac{\hat{E}}{\eta(\varepsilon(u(t)), \varepsilon_v(t))} \varepsilon_v(t) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ \frac{\hat{E}}{\eta(\varepsilon(u(t)), \varepsilon_v(t))} \varepsilon(u(t)) \end{array} \right\}, \quad (6.14)$$

$$t \in [0 \text{ s}, 1 \text{ s}], \quad u(0) = u_0, \quad \dot{u}(0) = v_0, \quad \varepsilon_v(0) = \varepsilon_{v0}$$

Das in Gl. (6.14) aufgestellte Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung ist von der Verschiebung $u(t)$ und der sogenannten viskosen Verzerrung $\varepsilon_v(t)$ abhängig. Zur Vervollständigung der homogenen Bewegungsgleichung ist die viskose Federkraft F_v über die lineare Kinematik der Feder $\varepsilon(u(t)) := u(t)/L$ definiert als

$$F_v := \sigma(\varepsilon(u(t)), \varepsilon_v(t))A, \quad (6.15)$$

mit der Spannung $\sigma(\varepsilon(u(t)), \varepsilon_v(t))$ und der konstanten Querschnittsfläche A . Für den Spannungsalgorithmus wird das in Abschnitt 2.5.3.5 eingeführte eindimensionale Dreiparameter-Modell der Viskoelastizität, siehe Abb. 2.7, mit einer nichtlinearen, prozessabhängigen Viskositätsfunktion $\eta(\varepsilon(u(t)), \varepsilon_v(t))$, siehe Gl. (2.233), verwendet, sodass mit Gl. (2.227) alle Beziehungen zur Beschreibung des nichtlinearen Federverhaltens vorliegen. Die gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung in Gl. (6.14) für $\varepsilon_v(t)$, vergleiche mit Gl. (2.228), modelliert die Evolution der viskosen Verzerrung, die für das konkrete Beispiel eine skalarwertige innere Variable repräsentiert. Um eine identische Steifigkeit für die lineare Gleichgewichtskennlinie im Vergleich zu der im vorigen Abschnitt 6.1.1 spezifizierten Federsteifigkeit c nachzubilden, werden die Parameter E , A und die Länge L aus Abb. 6.7 an $c := EA/L$ angepasst.

Zur Durchführung der Zeitdiskretisierung mittels der Trapezregel (Trapez/CAA) und der Generalized- α Methode (Gen- α) ist es erforderlich, die Anfangsbeschleunigung a_0 , sowie die viskose Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\varepsilon}_{v0}$ zum Initialisierungszeitpunkt $t = 0$ s durch Zuhilfenahme des ODE-Systems (6.14) zu bestimmen. Unter Berücksichtigung der gewählten Anfangsbedingungen u_0 , v_0 und ε_{v0} resultiert

$$a_0 = -\frac{EA}{m} \frac{u_0}{L} = -4\pi^2 \text{ mm s}^{-2}, \quad \dot{\varepsilon}_{v0} = 0 \text{ s}^{-1}.$$

Dem nichtlinearen Konstitutivmodell der Feder Rechnung tragend, findet zur Realisierung der temporalen Konvergenzstudien eine hochgenaue numerische Lösung, generiert mit dem Verfahren nach Alexander/Cash (Alex3/Cash3, $\Delta t_n = 10^{-5}$ s), als Referenzlösung Anwendung. Die Ordnungsdiagramme 6.8a bis 6.8c zeigen, dass alle Verfahren ihre theoretische Konvergenzordnung erreichen. Wie bereits in Abschnitt 5.2.2 erläutert, ist die Einbettung von DIRKN-Methoden in das Konzept mit inneren Variablen nicht realisierbar, sodass die direkten **SDIRKN**-Verfahren Sharp3 und Sharp4 nicht in die Untersuchungen einbezogen werden. Abb. 6.8d zeigt ein Vergleich der Verschiebungskennlinien zwischen dem linear-elastischen Einmassenschwinger aus Abschnitt 6.1.1 und dem hier vorgestellten nichtlinearen Einfreiheitsgradsystem, wobei der physikalisch dämpfende Charakter des viskoelastischen Konstitutivmodells deutlich wird. Die zugehörigen Berechnungen in Abb. 6.8d wurden mit dem Alex2/Ell-Integrator und einem konstanten Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-4}$ s ausgeführt.

6.1.3 Elastischer Stab

Zur Beschreibung von Kontinuumsschwingungen in einem eindimensionalen, geometrisch linearen Stab reduziert sich die allgemeine dreidimensionale Impulsbilanz (2.149) auf

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} + n(x, t) = \varrho(x) A(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}, \quad (6.16)$$

wobei $u(x, t)$ das eindimensionale Verschiebungsfeld, $N(x, t)$ die Normalkraft in einem materiellen Punkt des Stabs, $n(x, t)$ eine vorgegebene axiale Streckenlastfunktion,¹¹ $\varrho(x)$ die Massendichte und $A(x)$ eine veränderliche Querschnittsfläche kennzeichnen. Zur Vereinfachung wird die Konstanz der Massendichte und der Querschnittsfläche, d. h. $\varrho(x) = \text{const.}$ und $A = \text{const.}$ sowie linear-elastisches Materialverhalten

$$N(x, t) = \sigma(x, t) A = EA \varepsilon(x, t) \quad (6.17)$$

mit einem konstanten Elastizitätsmodul E , vorausgesetzt. Die zu $u(x, t)$ kompatible Verzerrung $\varepsilon(x, t)$ ist definiert als

$$\varepsilon(x, t) = \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}. \quad (6.18)$$

Für das in Abb. 6.9 dargestellte Berechnungsmodell ergibt sich nach Kombination der

¹¹Die axiale Streckenlast $n(x, t)$ imitiert im 1D-Fall die Volumenkraftdichte $\vec{k}(\vec{x}, t)$.

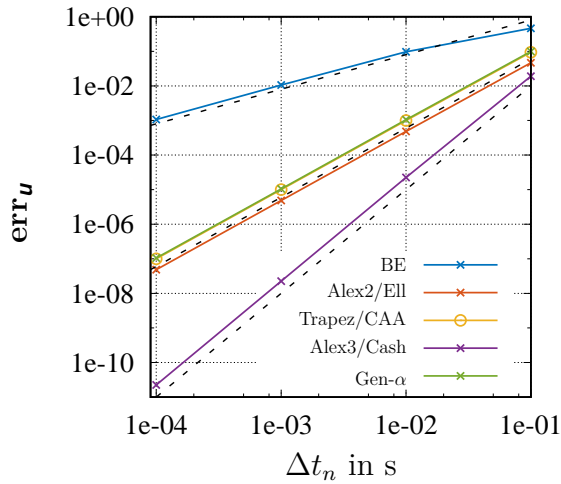
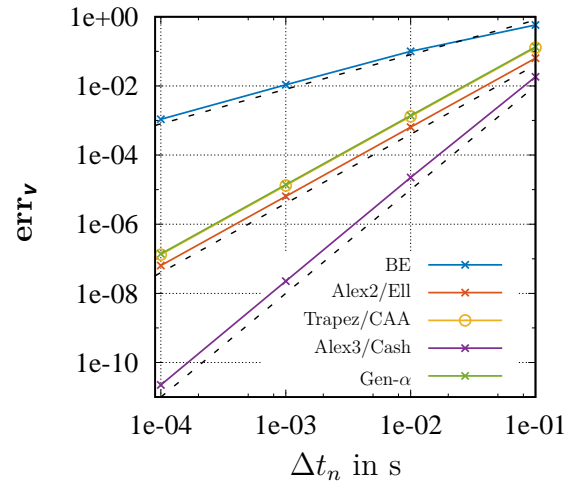
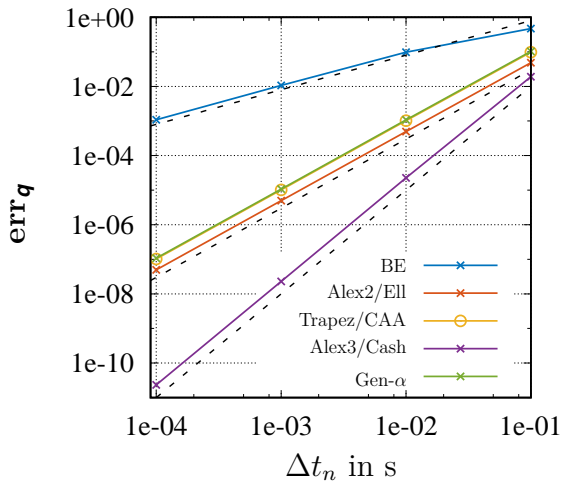
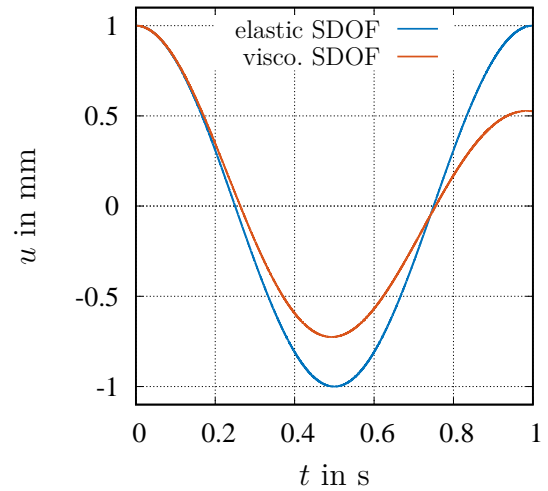

 (a) Globaler Fehler der Verschiebung $u(t)$

 (b) Globaler Fehler der Geschwindigkeit $v(t)$

 (c) Globaler Fehler für inneren Variablen $\varepsilon_v(t)$

 (d) Verschiebungsverlauf $u(t)$ (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 10^{-4}$ s)

Abbildung 6.8: Ordnungsdiagramme für nichtlineares Einfreiheitsgradsystem - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v , \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n ; Vergleich der Verschiebungskennlinien zwischen linear-elastischen Einmassenschwinger aus Abschnitt 6.1.1 und nichtlinearen Einfreiheitsgradsystem

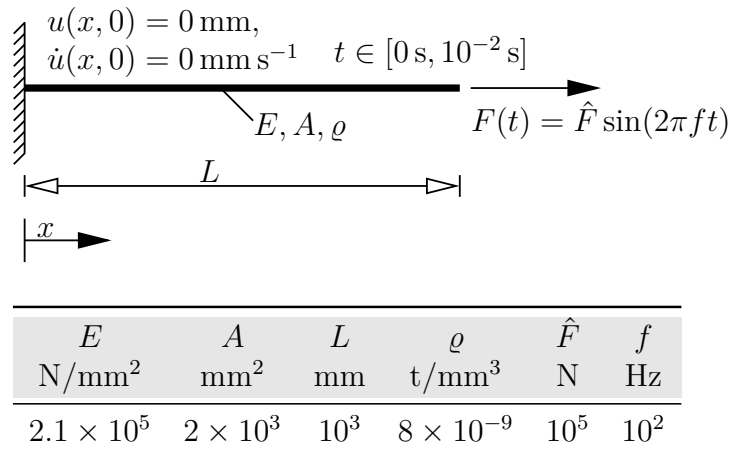


Abbildung 6.9: Berechnungsmodell eines linksseitig eingespannten, linear-elastischen Stabes unter äußerer Kraftanregung $F(t)$ am rechten Stabende

Beziehungen (6.16) bis (6.18) und bei außer Acht lassen einer axialen Streckenlast

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (6.19)$$

mit der Konstanten $c = \sqrt{E/\varrho}$. Diese lineare partielle hyperbolische Differentialgleichung (PDE) zweiter Ordnung beschreibt die Ausbreitung einer Longitudinalwelle im Stabkontinuum und wird daher auch als Wellengleichung bezeichnet.¹² Die Angabe der spezifischen Anfangsbedingungen

$$u(x, 0) := u_0(x) = 0 \text{ mm}, \quad \dot{u}(x, 0) := v_0(x) = 0 \text{ mm s}^{-1} \quad (6.20)$$

und Randbedingungen

$$u(0, t) := g(t) = 0 \text{ mm}, \quad \frac{\partial u(L, t)}{\partial x} = \varepsilon(L, t) := h(t) = \frac{F(t)}{EA} = \hat{\varepsilon} \sin(\Omega t), \quad (6.21)$$

mit $\Omega = 2\pi f$ und $\hat{\varepsilon} = \hat{F}/(EA)$, vervollständigt die Definition des zu behandelnden Anfangs-Randwertproblems (ARWP) aus Abb. 6.9.

Eine analytische Lösung des dokumentierten Problems mit detaillierten Herleitungsschritten findet sich in Anhang E.1. Auf Basis der analytischen Ausdrücke (E.29) und (E.30), welche als Referenzlösungen zur Berechnung des numerischen Fehlers im Verschiebungsfeld $u(x, t)$ und im Geschwindigkeitsfeld $v(x, t)$ zur Verfügung stehen, werden temporale Konvergenzordnungsuntersuchungen für die in Tab. D.1 angegebenen DIRK-Verfahren und die Generalized- α Methode, mit den konstanten Zeitschrittweiten $\Delta t_{n1} = 4 \times 10^{-5} \text{ s}$, $\Delta t_{n2} = 2 \times 10^{-5} \text{ s}$, $\Delta t_{n3} = 10^{-5} \text{ s}$, $\Delta t_{n4} = 5 \times 10^{-6} \text{ s}$, $\Delta t_{n5} = 2.5 \times 10^{-6} \text{ s}$, durchgeführt. Für die Generierung der analytischen Lösung wurden 10^4 Reihenglieder in den Gleichungen (E.29) und (E.30) berücksichtigt.¹³

¹²Die Konstante c hat die Bedeutung einer Ausbreitungsgeschwindigkeit in dem Stabmedium.

¹³Die in dieser Arbeit nicht gezeigten Konvergenzuntersuchungen zur Genauigkeit der analytischen Lösungen (E.29) und (E.30) ergaben, dass die Berücksichtigung von $n = 1, \dots, 10^4$ Reihenglieder in den Summenausdrücken von Abschnitt E.1 sehr exakten Näherungen entsprechen.

Im Allgemeinen können aus der Raum- und Zeitdiskretisierung resultierende Fehler bei der Behandlung des ARWP (6.19) bis (6.21) nicht unabhängig voneinander betrachtet werden. Um zunächst nur den Einfluss der Raumdiskretisierung analysieren zu können, wird der Raumdiskretisierungsfehler des zugehörigen mit Stabelementen räumlich parametrisierten elliptischen Eigenwertproblems, siehe [Hughes, 2000, S. 418–455], studiert. Die Verteilung der Elemente erfolgt äquidistant. In Abb. 6.10 ist das relative positive

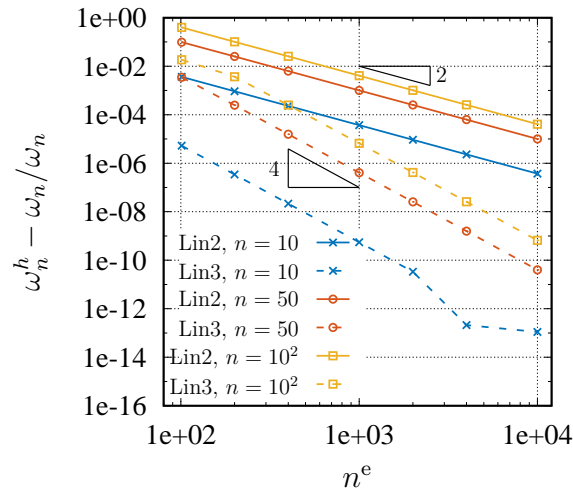


Abbildung 6.10: Raumkonvergenzstudie der aus der Raumdiskretisierung resultierenden Eigenkreisfrequenzen ω_n^h für den in Abb. 6.9 dargestellten linksseitig eingespannten, linear-elastischen Stab - Relativer Fehler in den Eigenkreisfrequenzen $\mathbf{err}_{\omega_n} = \omega_n^h - \omega_n / \omega_n$ in den Schwingungsmoden $n = \{10, 50, 100\}$, aufgetragen über der Elementanzahl n^e für Diskretisierungen mit 2-knotigen linearen bzw. 3-knotigen quadratischen Stabelementen (Lin2 bzw. Lin3)

Fehlermaß $\mathbf{err}_{\omega_n} = (\omega_n^h - \omega_n) / \omega_n$ der Eigenkreisfrequenzen des Stabkontinuums für die Schwingungsmoden $n = 1, \dots, n_{\text{uu}} = n^n - 1$ über der Anzahl Elemente n^e aufgetragen.¹⁴ Neben 2-knotigen linearen Stabelementen kommen auch 3-knotige quadratische Stabelemente zum Einsatz. Die Trägheitseigenschaften des diskretisierten Stabkontinuums werden über eine konsistente Massenmatrix nachgebildet. Für den mit zunehmender Feinheit des FE-Netzes abnehmenden relativen Fehler in Abb. 6.10 gibt Hughes [2000, S. 434] im Kontext der Behandlung von hyperbolischen und elliptischen Eigenwertproblemen die Standard-Fehlerabschätzung $\mathbf{err}_{\omega_n} = \mathcal{O}(h^{2(p+1-m_u)})$, $h = 1/n^e$, an, wobei p den Polynomgrad der Ansatzfunktionen repräsentiert und m_u die höchste in $\delta\pi_{\text{int}}$ vorkommende Ableitungsordnung im Raum, d. h. $m_u = 1$, kennzeichnet. Die beobachteten räumlichen Konvergenzraten in Abb. 6.10 stimmen mit dem angegebenen theoretischen Resultat überein. Weiterhin lässt sich hieraus schlussfolgern, dass die gewählten Quadraturordnungen, siehe Abschnitt 5.1, zur Integration der elementbezogenen Massen- und Steifigkeitsmatrix korrekt abgestimmt sind. Aus der Isolation des räumlichen Approximationsfehlers folgt, dass für eine quadratische Diskretisierung mit $n^e = 10^4$ finiten

¹⁴Wegen $\omega_n \leq \omega_n^h$, siehe [Hughes, 2000], gilt für den Zähler des relativen Fehlermaß \mathbf{err}_{ω_n} : $\omega_n^h - \omega_n \geq 0$

Elementen \mathbf{err}_{ω_n} für die Schwingungsmoden $n \leq 100$, wobei bereits $\omega_{100} \approx 1.6 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ eine bemerkenswert große Eigenkreisfrequenz ausdrückt, durch $\mathbf{err}_{\omega_{100}} < 10^{-9}$ beschränkt wird. Die Gebietszerlegung mittels eines äquidistanten quadratischen Gitters mit $n^e = 10^4$ Elementen erscheint daher ausreichend genau zu sein. In Kombination mit dem gewählten FE-Netz resultiert eine maximale Eigenkreisfrequenz von $\omega_{\max}^h = \omega_{20\,000}^h \approx 4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, die nach Hughes [2000, S. 514] für die zentrale Differenzenmethode¹⁵ ein Stabilitätslimit für den Zeitschritt in der Größenordnung $\Delta t_n = 2/\omega_{\max}^h \approx 2.5 \times 10^{-9} \text{ s}$ impliziert. Obwohl für die in der vorliegenden Arbeit behandelten unbedingt stabilen Einschrittverfahren eine solche kritische Zeitschrittweite nicht existiert, rechtfertigt diese Abschätzung die zu Beginn des Abschnitts sehr klein gewählten Zeitschrittweiten Δt_{nk} , $k = 1, \dots, 5$.

Die Resultate der temporalen Ordnungsanalysen sind in den Abb. 6.11a und 6.11b dargestellt. Es zeigt sich deutlich, dass sämtliche Zeitintegrationsverfahren hinter den

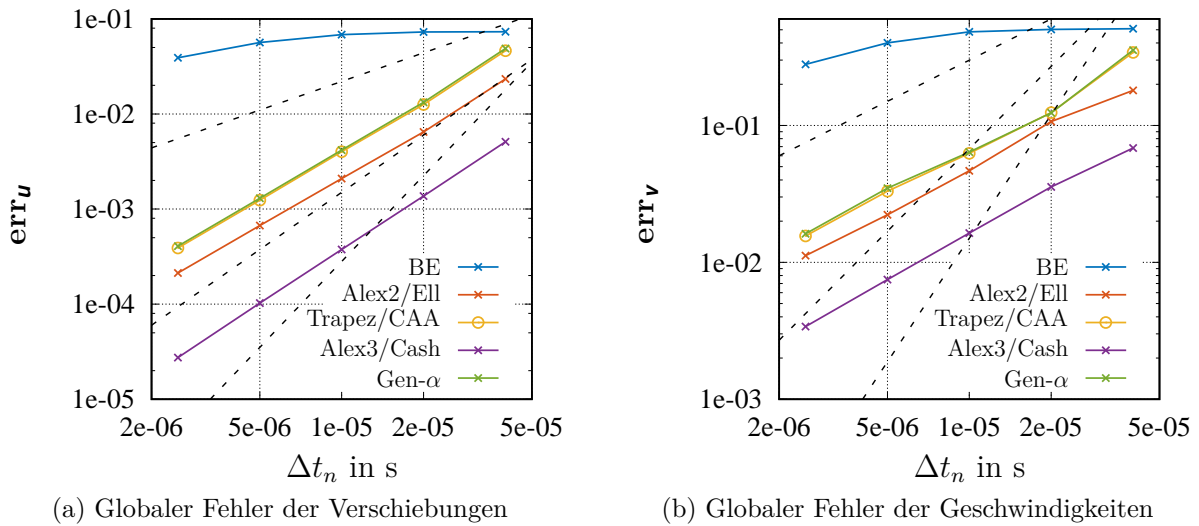


Abbildung 6.11: Ordnungsdiagramme für linear-elastischen Stab - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_v aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

theoretischen Erwartungen zurückbleiben. So erreichen die hochgenauen DIRK-Verfahren Trapez/CAA, Alex2/Ell und Alex3/Cash sowie die Generalized- α Methode für den Zeitintegrationsfehler im Verschiebungsfeld lediglich die Konsistenzordnungen $p_{\text{Trapez/CAA}} \approx 1.72$, $p_{\text{Alex2/Ell}} \approx 1.70$, $p_{\text{Alex3/Cash}} \approx 1.89$, $p_{\text{Gen-}\alpha} \approx 1.72$. Der Blick auf den numerischen Fehler des Geschwindigkeitsfeldes in Abb. 6.11b offenbart noch unbefriedigendere Tendenzen. Zwar werden die Abstufungen der relativen Fehlerkonstanten der Integratoren korrekt wiedergegeben, jedoch sind die numerisch beobachteten Konvergenzordnungen durch $p_{\text{Trapez/CAA}} = p_{\text{Alex2/Ell}} = p_{\text{Alex3/Cash}} = p_{\text{Gen-}\alpha} \approx 1$ limitiert. Als Begründung für diesen Widerspruch zur Theorie werden aus Sicht des Autors die folgenden spekulativen Feststellungen angeführt:

- Der im Vergleich zur Quasistatik bei strukturdynamischen Problemstellungen gegenwärtige hyperbolische Lösungscharakter sorgt für eine enge Verflechtung zwischen

¹⁵Das zentrale Differenzenverfahren ist ein explizites, bedingt stabiles Newmark-Verfahren, siehe auch Tab. D.4.

Raum- und Zeitintegration, sodass die beobachteten Konvergenzreduktionen aus einem Zusammenspiel beider Faktoren hervorgehen. Im Kontext quasistatischer Problemstellungen zeigen Rothe et al. [2012], Netz [2013], Netz und Hartmann [2015] und Rothe et al. [2015b], dass DIRK-Verfahren prinzipiell in der Lage sind, die theoretisch zu erwartenden Konvergenzordnungen einzuhalten.

- Wie bereits z. B. von Carpenter et al. [1995], Pathria [1997] und Calvo und Palencia [2002] für allgemeine RK-Methoden gezeigt, erfahren die angeführten Einschrittverfahren für transiente Problemstellungen im Fall nichtlinearer Randbedingungen Ordnungsreduktionen,¹⁶ siehe hierzu auch [Quint, 2012; Rothe et al., 2015b]. Obwohl nach Wissen des Autors diese Untersuchungen bislang nur für zeitabhängige Dirichlet-Randbedingungen veröffentlicht wurden, wird für das behandelte AR-WP auch durch die nichtlineare Neumann-Randbedingung (6.21)₂ eine negative Einflussnahme auf die Konvergenzordnung erwartet.
- Temporale Konvergenzstudien von praxisorientierten Beispielen sind in der wissenschaftlichen Gemeinschaft mitunter sehr rar. Aus diesem Grund existiert auch keine einheitliche Auswertungsprozedur. Einige Autoren, wie z. B. Erlicher et al. [2002], werten den numerischen Zeitintegrationsfehler ausschließlich am Ende des betrachteten Zeitintervalls aus und können so mit Übereinstimmungen zwischen Theorie und Praxis überzeugen. Das in der vorliegenden Arbeit angewendete Auswertungskonzept für die temporalen Konvergenzstudien, siehe Abschnitt 6.1, bezieht jedoch das gesamte betrachtete Zeitintervall $[t_0, t_e]$ ein. Die sich aufgrund des transienten Lösungscharakters von Gl. (6.19) ausbildenden Diskontinuitäten in der Geschwindigkeit und Verzerrung werden daher miterfasst und bewirken ein Degenerieren der Konvergenzordnung, siehe hierzu auch die Abbildungen 6.14 und 6.15.

6.1.4 Viskoelastischer Stab

Im folgenden Abschnitt findet eine Ersetzung des linear-elastischen Materialverhaltens des Stabs aus Abb. 6.9 durch das in Abschnitt 2.5.3.5 spezifizierte eindimensionale nichtlineare Viskoelastizitätsmodell statt. Abb. 6.12 illustriert das modifizierte Berechnungsmodell, dessen zugehöriges Anfangs-Randwertproblem vollständig durch den Gleichungssatz

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} = \varrho A \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}, \quad N = \sigma A, \quad \sigma = E\varepsilon + \hat{E}(\varepsilon - \varepsilon_v), \quad \varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (6.22)$$

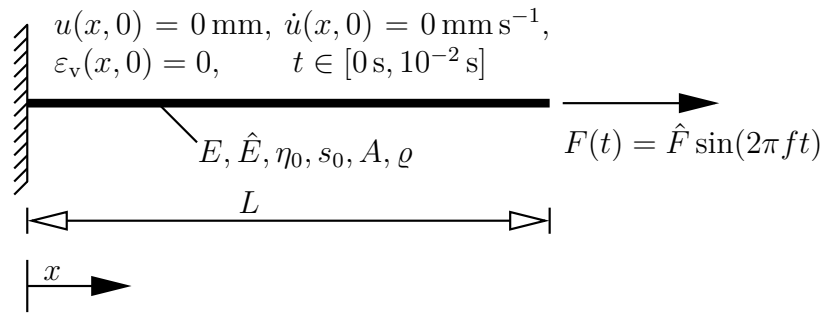
$$\dot{\varepsilon}_v = \frac{\hat{E}}{\eta}(\varepsilon - \varepsilon_v), \quad \eta = \eta_0 e^{-s_0|\sigma - E\varepsilon|},$$

$$u(x, 0) = 0 \text{ mm}, \quad \dot{u}(x, 0) = 0 \text{ mm s}^{-1}, \quad \varepsilon_v(x, 0) = 0, \quad (6.23)$$

$$u(0, t) = 0 \text{ mm}, \quad N(L, t) = F(t) \quad (6.24)$$

zusammengefasst wird. Für das betrachtete physikalisch nichtlineare System sind erneut Berechnungen mit den in Tab. D.1 aufgelisteten Integratoren mit konstanten Zeitschritten $\Delta t_n = \{5 \times 10^{-4} \text{ s}, 10^{-4} \text{ s}, 5 \times 10^{-5} \text{ s}, 10^{-5} \text{ s}\}$ durchgeführt und deren zeitliches

¹⁶Von Eidel und Kuhn [2011] und Eidel et al. [2013] propagierte Ordnungsreduktionsphänomene sind allerdings hiermit nicht gemeint.



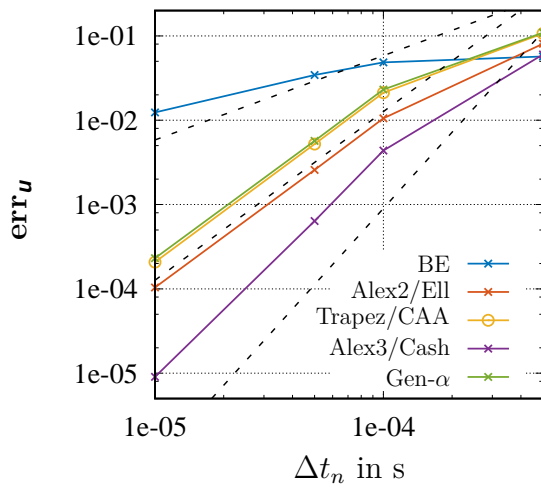
E N/mm ²	\hat{E} N/mm ²	η_0 N s/mm ²	s_0 MPa ⁻¹	A mm ²	L mm	ϱ t/mm ³	\hat{F} N	f Hz
2.1×10^5	2.1×10^5	13	1.1	2×10^3	10^3	8×10^{-9}	10^5	10^2

Abbildung 6.12: Geometrisch lineares Berechnungsmodell eines linksseitig eingespannten, nichtlinear-viskoelastischen Stabes unter äußerer Kraftanregung $F(t)$ am rechten Stabende

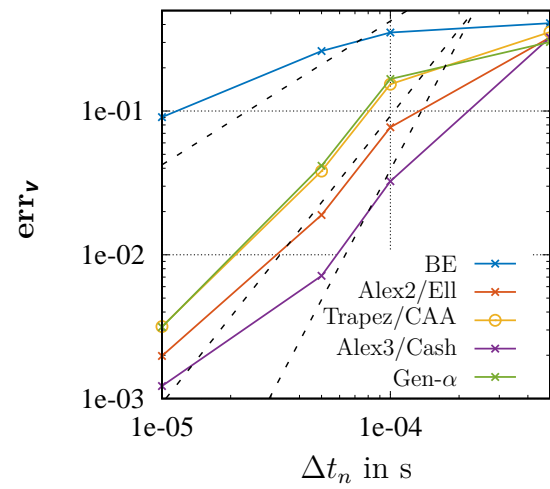
Konvergenzverhalten untersucht worden. Die durch die Viskositätsfunktion (6.22)₆ induzierte nichtlineare Ratenabhängigkeit des Konstitutivmodells steht dem Auffinden einer geschlossenen analytischen Lösung entgegen. Zur Berechnung der Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v und \mathbf{err}_q wird daher auf eine hochgenaue numerische Referenzlösung, die aus dem Einsatz des Alex3/Cash-Verfahren und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-6} \text{ s}$ hervorgeht, zurückgegriffen. Die im vorhergehenden Abschnitt 6.1.3 gezogenen Schlussfolgerungen zur Raumkonvergenzuntersuchung, siehe Abb. 6.10, legen nahe, die Vernetzung mit $n^e = 10^4$ quadratischen finiten Elementen (Lin3) unverändert zu übernehmen. Zur Imitation der Trägheit wird eine konsistente Massenmatrix gewählt.

Die Resultate der Ordnungsanalysen zeigen die Abbildungen 6.13a bis 6.13c. Die Präsenz eines inhärent im Materialmodell verankerten physikalischen Dämpfungsmechanismus führt im Vergleich zu den Ordnungsuntersuchungen in Abb. 6.11a und 6.11b offensichtlich zu einem verbesserten Konvergenzverhalten. So erreichen alle hochgenauen DIRK-Verfahren und die Generalized- α Methode in Bezug auf das Verschiebungsfeld ihre theoretische Konsistenzordnung. Obwohl das globale Fehlerdiagramm der Geschwindigkeiten 6.13b Abweichungen von der Theorie offenbart, ist dennoch bei Gegenüberstellung mit Abb. 6.11b eine deutlich positive Veränderung festzustellen. Aus dem Ordnungsdiagramm der inneren Variablen 6.13c lässt sich ableiten, dass ab einer Schrittweite $\Delta t_n \geq 10^{-4} \text{ s}$ die Zeitintegrationsverfahren Trapez/CAA, Alex2/Ell, Alex3/Cash sowie die Generalized- α Methode eine Konsistenzordnung $p = 2$ nicht unterschreiten.

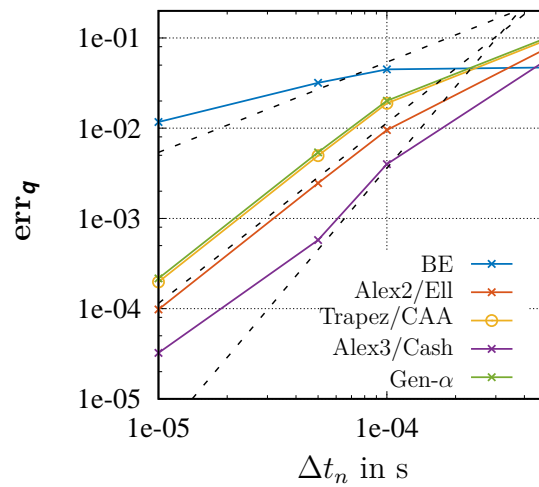
Eine anschaulichere Interpretation der in diesem und in Abschnitt 6.1.3 getroffenen Aussagen liefern die Abbildungen 6.14 und 6.15, in denen die Strukturantworten der beiden Berechnungsmodelle 6.9 (elastic) und 6.12 (visco) gegenübergestellt sind. Der Vergleich der beiden Abb. 6.14a und 6.14b zeigt, dass das Schwingungsverhalten des linear-elastischen Stabs deutlich stärker durch Diskontinuitäten geprägt ist. Infolge der viskosen Dämpfungseigenschaften des Materials werden in Abb. 6.14b nahezu alle hoch-



(a) Globaler Fehler der Verschiebungen



(b) Globaler Fehler der Geschwindigkeiten



(c) Globaler Fehler der inneren Variablen

 Abbildung 6.13: Ordnungsdiagramme für nichtlinear-viskoelastisches Stabkontinuum - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v , \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

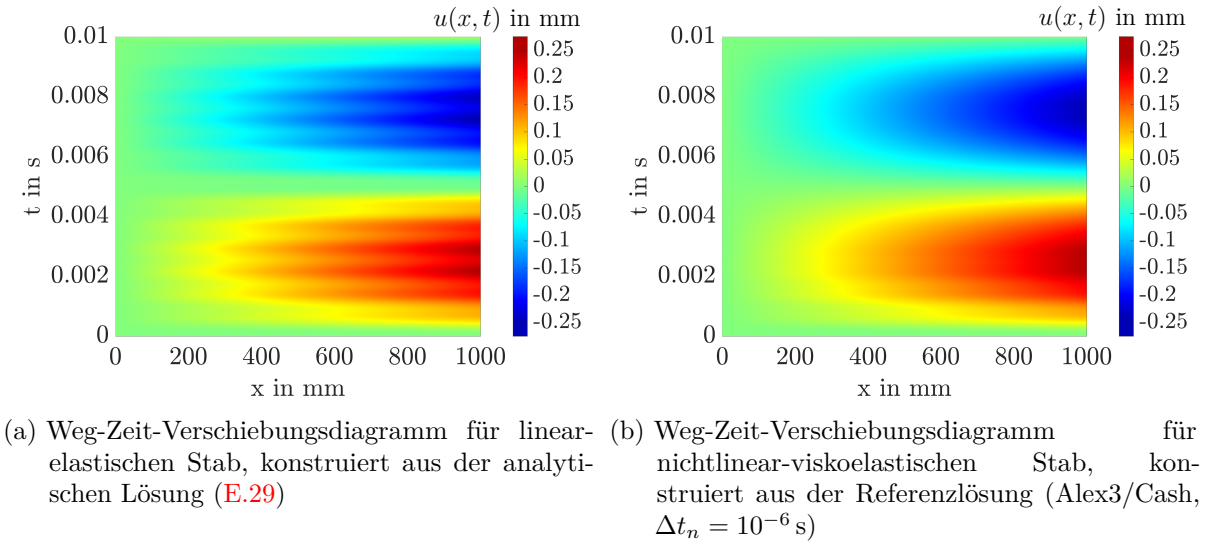


Abbildung 6.14: Gegenüberstellung des Schwingungsverhalten der stabförmigen Strukturmodelle 6.9 und 6.12

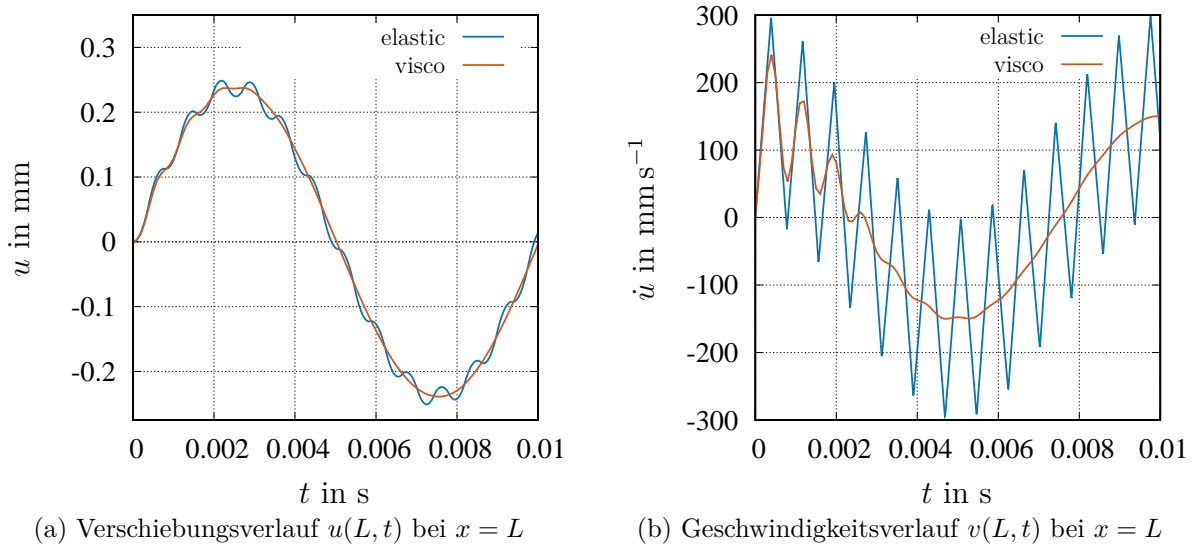


Abbildung 6.15: Gegenüberstellung des Schwingungsverhalten der Modelle aus Abb. 6.9 und Abb. 6.12

frequenten Bestandteile herausgefiltert. Untermuert werden diese Feststellungen durch die Abbildungen 6.15a und 6.15b, die den Verschiebungs- und Geschwindigkeitsverlauf am Stabende bei $x = L$ visualisieren.

6.1.5 Linear-elastische Elastomerprobe

Zur Demonstration des temporalen Konvergenzverhaltens der zu analysierenden numerischen Verfahren aus Tab. D.1 im Rahmen dreidimensionaler strukturdynamischer Problemstellungen werden an einem Zugprobekörper, siehe Abbildung 6.16a, eines rußge-

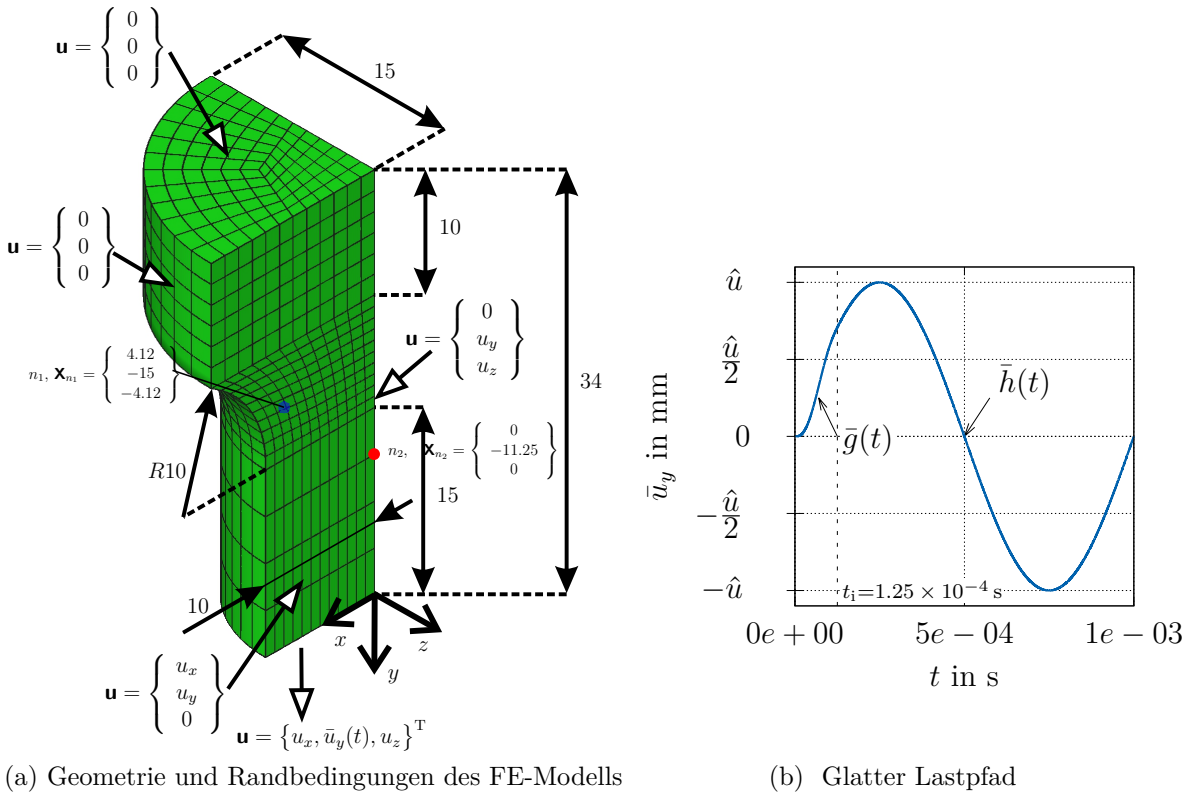


Abbildung 6.16: FE-Modell mit Abmessungen und aufgebrauchten Randbedingungen eines rotationssymmetrischen Elastomerprobekörpers; Illustration des zweimal stetig differenzierbaren Lastpfads $\bar{u}_y(t)$

füllten Elastomers, welches typischerweise bei der Herstellung von Fahrzeugreifen zum Einsatz kommt, temporale Konvergenzstudien durchgeführt. Zur Beschreibung des Materialverhaltens wird zunächst für dieses erste dreidimensionale Beispiel das Materialmodell der linearen Elastizität aus Abschnitt 2.5.3.4 mit einer Parametrisierung durch den Kompressionsmodul K und den Schubmodul G , siehe auch Tab. 6.1, gewählt. Unter Ausnutzung der Rotationssymmetrie des Probekörpers ist es ausreichend, ein Achtel der Struktur mit $n^e = 2160$ quadratischen Hexaeder-Elementen (Hex20) zu diskretisieren.¹⁷

¹⁷Das FE-Modell aus Abb. 6.16a mit insgesamt $n^n = 10121$ Knoten setzt sich aus $n_{uu} = 26739$ unbekannten Verschiebungsfreiheitsgraden und $n_{up} = 3624$ durch Verschiebungsrandbedingungen fixierten Freiheitsgraden zusammen.

Tabelle 6.1: Spezifikation des Berechnungsmodells - Materialkonstanten K , G , ρ der linear-elastischen Elastomerprobe sowie Festlegen der Lastamplitude \hat{u} und Anregungsfrequenz f

K N/mm ²	G N/mm ²	ρ t/mm ³	\hat{u} mm	f Hz
7.490	7.748×10^{-1}	9.2×10^{-10}	1	10^3

Neben den hierdurch induzierten Symmetrierandbedingungen an den seitlichen Schnittflächen sind die Kopfflächen der Knochenprobe fixiert, wodurch das Einspannen des oberen Teils der Probe in eine Zug-Druck-Prüfmaschine imitiert wird. Das Aufbringen einer verschiebungsgesteuerten Belastung

$$\bar{u}_y(t) = \begin{cases} \bar{g}_y(t) = \sum_{i=0}^5 a_i \tau^i(t), & t_0 \leq t < t_i, \\ \bar{h}_y(t) = \hat{u} \sin(2\pi f t), & t_i \leq t \leq t_e, \end{cases} \quad \tau(t) = (t - t_0)/(t_i - t_0) \quad (6.25)$$

mit $t_i = 1.25 \times 10^{-4}$ s und

$$\mathbf{a}^T = \{a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} \approx \{0, 0, 0, 4.632, -6.282, 2.358\} \text{ mm},$$

auf die Fußfläche innerhalb des betrachteten Zeitintervalls $t \in [0 \text{ s}, 10^{-3} \text{ s}]$ geschieht mittels dem in Abb. 6.16b visualisierten Lastpfad. Die Lastamplitude \hat{u} und die Anregungsfrequenz f sind in Tab. 6.1 aufgeführt. Zur Vermeidung diskontinuierlicher Geschwindigkeits- und Beschleunigungsverläufe zum Initialisierungszeitpunkt $t_0 = 0$ s wird für $\bar{g}_y(t)$ innerhalb $t \in [t_0, t_i]$ eine Polynomfunktion fünften Grades durch die Bedingungen

$$\bar{g}_y(t_0) = 0 \text{ mm}, \quad \dot{\bar{g}}_y(t_0) = 0 \text{ mm/s}, \quad \ddot{\bar{g}}_y(t_0) = 0 \text{ mm/s}^2, \quad (6.26)$$

$$\bar{g}_y(t_i) = \bar{h}_y(t_i), \quad \dot{\bar{g}}_y(t_i) = \dot{\bar{h}}_y(t_i), \quad \ddot{\bar{g}}_y(t_i) = \ddot{\bar{h}}_y(t_i) \quad (6.27)$$

generiert, siehe hierzu auch [Systèmes, 2014]. Während die Vorgaben (6.26) einen Belastungsprozess aus der Ruhe initiieren, gewährleisten die Bedingungen (6.27) ähnlich zu einer Spline-Interpolation einen glatten Übergang zwischen $\bar{g}_y(t)$ und der sinusförmigen Anregungsfunktion $\bar{h}_y(t)$. Das zur Bestimmung der Polynomkoeffizienten $\mathbf{a}^T = \{a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\}$ resultierende lineare Gleichungssystem nimmt die Gestalt

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 6 & 12 & 20 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddot{\bar{h}}_y(t_i)(t_i - t_0)^2 \\ \dot{\bar{h}}_y(t_i)(t_i - t_0) \\ \bar{h}_y(t_i) \\ \ddot{\bar{g}}_y(t_0)(t_i - t_0)^2 \\ \dot{\bar{g}}_y(t_0)(t_i - t_0) \\ \bar{g}_y(t_0) \end{bmatrix} \quad (6.28)$$

an. Zur Sicherstellung der Konsistenz zwischen den Anfangsbedingungen und den Randbedingungen zum Initialisierungszeitpunkt t_0 sind die Anfangsbedingungen durch

$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm}$ und $\dot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm s}^{-1}$ festgelegt. Weiterhin folgt aus der Auswertung des in Tab. 5.3 spezifizierten Differentialgleichungssystems zweiter Ordnung mit einer konsistenten Massenmatrix die Anfangsbeschleunigung $\ddot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm s}^{-2}$.

Zur Berechnung der Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_v , siehe hierzu die Definitionen der Fehlermaße (6.1)₁ und (6.1)₂, wird eine numerische Referenzlösung mit dem Alexander/Cash Verfahren (Alex3/Cash) und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-7} \text{ s}$ herangezogen. Der innerhalb des gesamten Zeitintervalls $t \in [0 \text{ s}, 10^{-3} \text{ s}]$ maximal auftretende relative Fehler ist in Abb. 6.17a für das Verschiebungsfeld und in Abb. 6.17b für das Geschwindigkeitsfeld über der Zeitschrittweite Δt_n dargestellt. Die für die jeweilige struk-

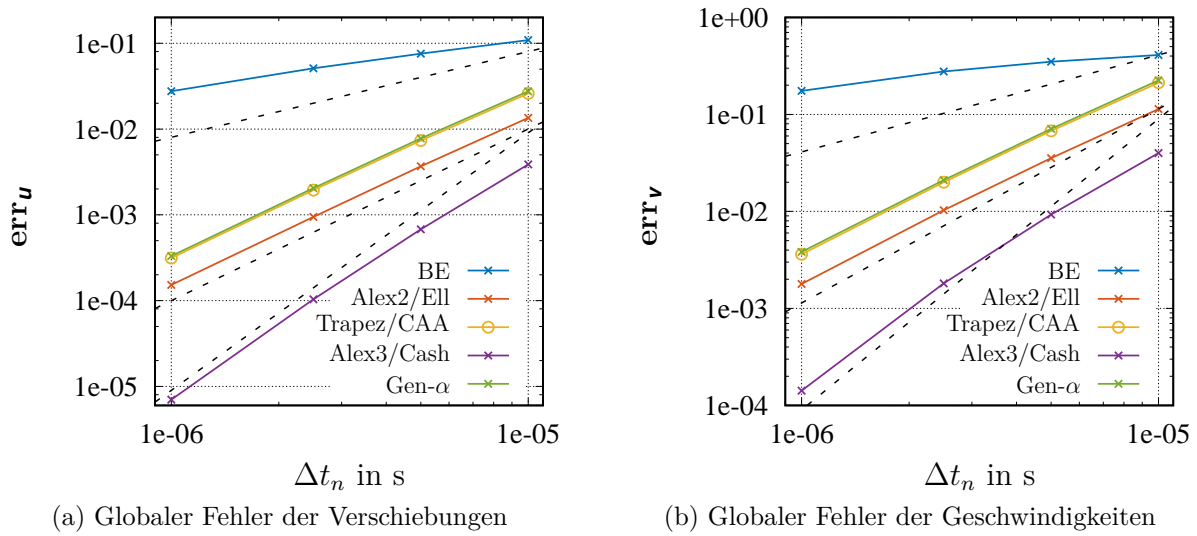


Abbildung 6.17: Ordnungsdiagramme für linear-elastische Elastomerprobe - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_v aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

turdynamische Berechnung konstante Schrittweite Δt_n stammt aus dem limitierten Satz $\Delta t_n = \{10^{-5} \text{ s}, 5 \times 10^{-6} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-6} \text{ s}, 10^{-6} \text{ s}\}$. Die Abbildung 6.17 enthüllt, dass alle DIRK-Verfahren höherer Ordnung und die Generalized- α Methode, siehe auch Tab. D.1, die theoretische Konvergenzordnung erreichen. Das implizite Euler-Verfahren (BE) weicht dagegen von der Theorie geringfügig ab. Es wird die Vermutung aufgestellt, dass die stark ausgeprägte algorithmische Dämpfung des Integrators zu dem beobachteten Verhalten führt.

Zur Verifikation des *Inhouse*-Code *Tasafem* werden für das konkretisierte strukturdynamische Problem aus Abb. 6.16 Simulationen zwischen *Tasafem* und dem kommerziellen FEM-Programm *ABAQUS*¹⁸ mit verschiedenen Zeitintegratoren (BE, Trapez/CAA, HHT- α) und einer konstanten Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-5} \text{ s}$ gegenübergestellt.¹⁹ Eine

¹⁸Für detaillierte Informationen zu *ABAQUS* wird auf die zugehörige Dokumentation [Systèmes, 2014] verwiesen.

¹⁹Das FEM-Programm *ABAQUS* (*ABAQUS/Standard*) verfügt über keine existierende Implementation von DIRK-Verfahren oder der Generalized- α Methode. Im Rahmen von strukturdynamischen Simulationen greift der implizite FEM-Löser *ABAQUS/Standard* auf das implizite Euler-Verfahren (BE)

Auswertung der Strukturantwort erfolgt für das Verschiebungsfeld an den Knoten n_1 und n_2 , welche sich an den Positionen \mathbf{X}_{n_1} und \mathbf{X}_{n_2} , siehe Abb. 6.16a, befinden. Die Abb. 6.18a bis 6.18c veranschaulichen die Resultate der Verifikation, die eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den beiden Simulationswerkzeugen bestätigen. Darüber hinaus ist aus Abb. 6.18a ersichtlich, dass infolge der Zeitintegration mit dem impliziten Euler-Verfahren sämtliche hochfrequente Bestandteile der Systemantwort annihiliert werden sowie beachtliche Amplitudenreduktionen im Vergleich zu Abb. 6.18b oder Abb. 6.18c stattfinden. Die Verschiebungsverläufe resultierend aus der Zeitintegration mittels Trapezregel (Trapez/CAA) in Abb. 6.18b und Hilber-Hughes-Taylor Algorithmus (HHT- α , $\alpha_{\text{HHT}} = -0.05$) in Abb. 6.18c stimmen nahezu überein.

6.1.6 Hyperelastische Elastomerprobe

Im folgenden Abschnitt sollen die an der in Abb. 6.16a dargestellten Elastomerprobe durchgeführten Untersuchungen auf den geometrisch nichtlinearen Bereich ausgeweitet werden. Die Geometrie, Rand- und Anfangsbedingungen des FE-Berechnungsmodells werden dazu aus Abschnitt 6.1.5 unverändert übernommen. Das Konstitutivmodell der linearen Elastizität wird gegen ein in Abschnitt 2.5.3.1 erläutertes schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten ausgetauscht. Mit der Wahl des ersten Ansatzes für den volumetrischen Anteil der Formänderungsenergie aus Tab. 2.5 und der Selektion des isochoren Anteils der Formänderungsenergie nach Hartmann [2001b], siehe dritte Zeile in Tab. 2.6, ist das angewendete Hyperelastizitätsmodell vollständig determiniert. Die spezifische Parametrisierung des Modells ist in Tab. 6.2 zusammengefasst. Für weitere

Tabelle 6.2: Spezifikation des Berechnungsmodells - Parametrisierung des Materialmodells sowie Festlegen der Lastamplitude \hat{u} und Anregungsfrequenz f

K N/mm ²	c_{10} N/mm ²	c_{01} N/mm ²	c_{30} N/mm ²	ϱ_R t/mm ³	\hat{u} mm	f Hz
10^3	0.264	0.5	1.9×10^{-2}	9.2×10^{-10}	5	10^3

Details zu dem angegebenen Konstitutivmodell der finiten Elastizität sei auf [Haupt und Sedlan, 2001; Hartmann, 2001b; Hartmann, 2003] verwiesen. Reine verschiebungsbezogene Finite-Elemente-Verfahren zeigen ein zu steifes Verhalten im Zusammenhang mit der Berechnung von nahezu-inkompressiblen Materialien. Diesem Sachverhalt Rechnung tragend wird der quadratische Finite-Elemente-Typ Hex20 aus Abschnitt 6.1.5 durch eine Diskretisierung mit 20-knotigen Q2P1 Hexaeder-Elementen ersetzt. Derartige Verriegelungsphänomene (Locking-Phänomene) infolge mechanischer Inkompressibilität bzw. Nahezu-Inkompressibilität werden in der Literatur als „volume locking“ betitelt und

oder den Hilber-Hughes-Taylor Algorithmus (HHT- α) nach Hilber et al. [1977] zurück. Der implizite HHT- α -Integrator, siehe auch Tab. 5.7, aus der Klasse der direkten Einschrittverfahren wird standardmäßig in ABAQUS/Standard eingesetzt und entspricht einer Erweiterung der klassischen Newmark-Familie, sodass sämtliche Newmark- β Verfahren enthalten sind. Aus der Schnittmenge zwischen den gegenüberzustellenden FEM-Codes wurden daher exemplarisch die Verfahren BE, Trapez/CAA und HHT- α mit $\alpha_{\text{HHT}} = -0.05$ für die Verifikation herausgegriffen.

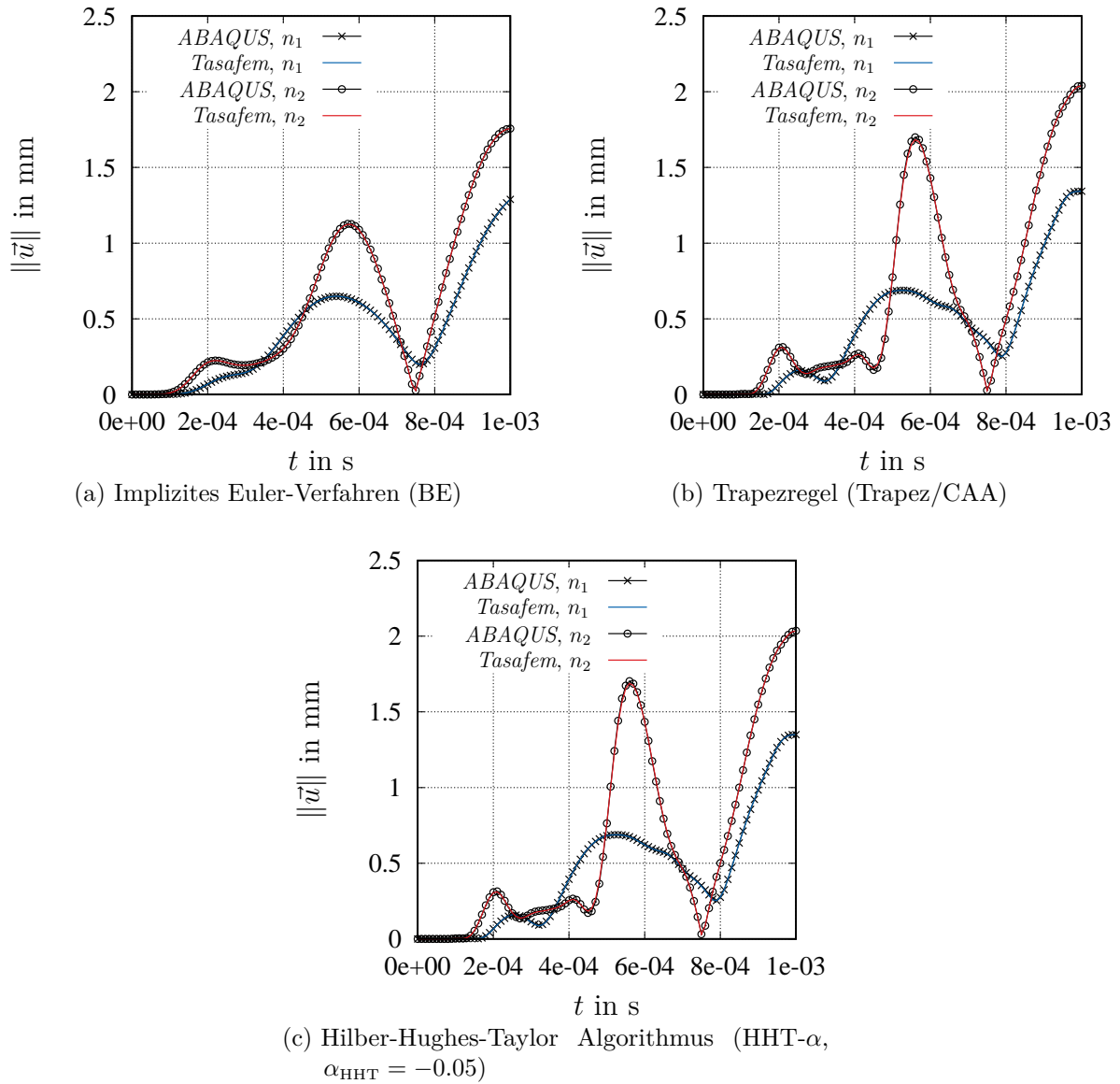


Abbildung 6.18: Verifikation von *Tasafem* und *ABAQUS* anhand der linear-elastischen Elastomerprobe mit verschiedenen Zeitintegratoren (BE, Trapez/CAA, HHT- α) und konstanter Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-5}$ s - Darstellung der ausgewerteten Verschiebungsantwort in den Knoten n_1 und n_2

können beispielsweise durch den Einsatz gemischter Elementformulierungen²⁰ umgangen werden.²¹ Alle anderen Diskretisierungsparameter des Berechnungsmodells in Abb. 6.16a, d. h. die Vernetzung, die Anzahl der Elemente und Wahl des Massenmatrix-Typs, bleiben im Vergleich zu Abschnitt 6.1.5 unverändert. Zur Induktion finiter Deformationen wird die Lastamplitude \hat{u} des in Abb. 6.16b illustrierten und durch Gl. (6.25) beschriebenen Belastungspfads auf $\hat{u} = 5$ mm vergrößert. Die aus Abschnitt 6.1.5 unverändert übernommene Anregungsfrequenz $f = 10^3$ Hz bewirkt innerhalb des betrachteten Zeitintervalls $t \in [0 \text{ s}, 10^{-3} \text{ s}]$ ein hochdynamisches, geometrisch nichtlineares Strukturverhalten des Zugprobenkörpers. Darüber hinaus impliziert die Anpassung der Lastparameter in Gestalt der Lastamplitude die Polynomkoeffizienten

$$\mathbf{a}^T = \{a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} \approx \{0, 0, 0, 23.158, -31.415, 11.792\} \text{ mm}.$$

Zur Übersicht ist die maßgebliche Spezifikation des Berechnungsmodells in Tab. 6.2 noch einmal zusammengefasst.

Für das betrachtete System sind erneut Berechnungen mit den in Tab. D.1 aufgelisteten Integratoren mit konstanten Zeitschrittweiten

$$\Delta t_n = \{5 \times 10^{-6} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-6} \text{ s}, 10^{-6} \text{ s}, 5 \times 10^{-7} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-7} \text{ s}, 10^{-7} \text{ s}\}$$

durchgeführt und deren temporales Konvergenzverhalten untersucht worden. Für die Berechnung des Zeitintegrationsfehlers wird eine numerische Referenzlösung mit dem Alexander/Cash Verfahren (Alex3/Cash) und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-8} \text{ s}$ generiert. Aus der Analyse der Abbildungen 6.19a und 6.19b folgt, dass sich sämtliche Verfahren, abgesehen vom impliziten Euler-Verfahren (BE) in Abb. 6.19b, asymptotisch ihren theoretischen Konvergenzverlauf annähern.

Zur Fortführung des Verifikationsprozesses für den in der vorliegenden Arbeit verwendeten *Inhouse*-Code *Tasafem* werden für das konkretisierte strukturdynamische System Berechnungen zwischen dem institutseigenen Simulationswerkzeug und *ABAQUS/Standard* mit diversen Zeitintegratoren (BE, Trapez/CAA, HHT- α) und einer konstanten Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-6} \text{ s}$ gegenübergestellt. Unter Beibehaltung der Auswertungspunkte n_1 und n_2 , siehe Abschnitt 6.1.5, zeigen die Abb. 6.20a bis 6.20c die in diesen Knoten ausgewertete Strukturantwort des Verschiebungsfelds. Die visuell konformen Kurvenverläufe der Simulationen mit *Tasafem* und *ABAQUS/Standard* bestätigen die korrekte Funktionsweise des entwickelten FE-Programms im Bereich der geometrisch nichtlinearen Strukturdynamik.

²⁰Die in der vorliegenden Arbeit verwendeten gemischten Elemente gehen auf einen Ansatz von Simo et al. [1985a] zurück. In der Fachliteratur finden die mit der räumlichen Diskretisierung assoziierten Elemente häufig als Q1P0- oder Q2P1-Elemente Erwähnung, wobei der vordere Zahlenwert die Interpolationsordnung (lineare oder quadratische Formfunktionen) für die gestalterhaltenden, kinematischen Variablen angibt und die hintere Ziffer den Funktionstyp (konstante oder lineare Ansatzfunktionen) für den zu diskretisierenden Druck sowie die volumetrische Verzerrungsgröße charakterisiert. Weitere Informationen sind z. B. [Simo und Taylor, 1991; Simo und Armero, 1992; Wriggers, 2008; Carstensen und Wriggers, 2009] zu entnehmen.

²¹Siehe für weitere Informationen zum Begriff „volumetric locking“ [Wriggers, 2008, S. 399 ff.] und [Bathe, 2002, S. 323 ff.] sowie die dort zitierte Literatur.

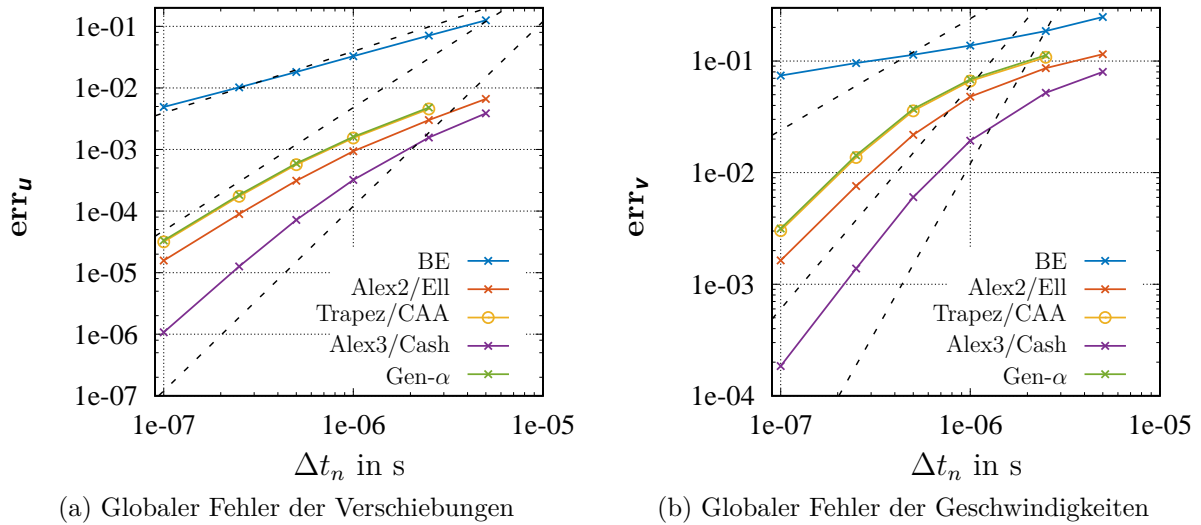


Abbildung 6.19: Ordnungsdiagramme für schwach-inkompressible, hyperelastische Elastomerprobe - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_v aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

6.1.7 Finite viskoelastische Elastomerprobe

Im folgenden Unterabschnitt sollen die strukturdynamischen Untersuchungen für das FE-Berechnungsmodell des Elastomerprobekörpers, siehe Abb. 6.16, unter einaxialer Beanspruchung fortgesetzt werden. Mit Ausnahme des Konstitutivmodells behalten sämtliche Aussagen zur Definition des Berechnungsmodells aus Abschnitt 6.1.6 ihre Gültigkeit. Das hyperelastische Materialverhalten des Elastomers wird gegen ein Überspannungsmodell der finiten Viskoelastizität, siehe Abschnitt 2.5.3.2 ausgetauscht, wobei die Wahl für die volumetrische Verzerrungsenergie $U(J)$ nun auf die zweite Form aus Tab. 2.5 fällt und der reversible Gleichgewichtsanteil für die gestaltändernde Formänderungsenergie $\bar{w}_{eq}(\mathbf{I}_{\bar{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\bar{\mathbf{C}}})$ durch den dritten Ansatz aus Tab. 2.6 festgelegt ist. Die zur vollständigen Beschreibung des Konstitutivmodells benötigten Materialparameter des Gleichgewichtsanteils c_{10} , c_{01} und c_{30} mit einem fiktiven Kompressionsmodul $K = 1000 \text{ MPa}$ sind der Arbeit von Hartmann [2001b] entnommen. Die Materialparameter des isochoren Überspannungsanteils mit prozessabhängiger Viskositätsfunktion stammen aus [Hartmann, 2003]. Zur Übersicht ist die komplette Parametrisierung des geschwindigkeitsabhängigen Stoffmodells in Tab. 6.3 zusammengefasst. Es sei explizit hervorgehoben, dass infolge der spezifischen Aufteilung

Tabelle 6.3: Materialparameter des finiten Viskoelastizitätsmodells aus Abschnitt 2.5.3.2 nach Hartmann [2003]

K N/mm ²	c_{10} N/mm ²	c_{01} N/mm ²	c_{30} N/mm ²	μ N/mm ²	η_0 Ns/mm ²	s_0 MPa ⁻¹	ϱ_R t/mm ³
10^3	0.264	0.5	1.9×10^{-2}	0.2	180	10^{-3}	9.2×10^{-10}

der Formänderungsenergie des verwendeten Konstitutivmodells, siehe Gl. (2.198), und der

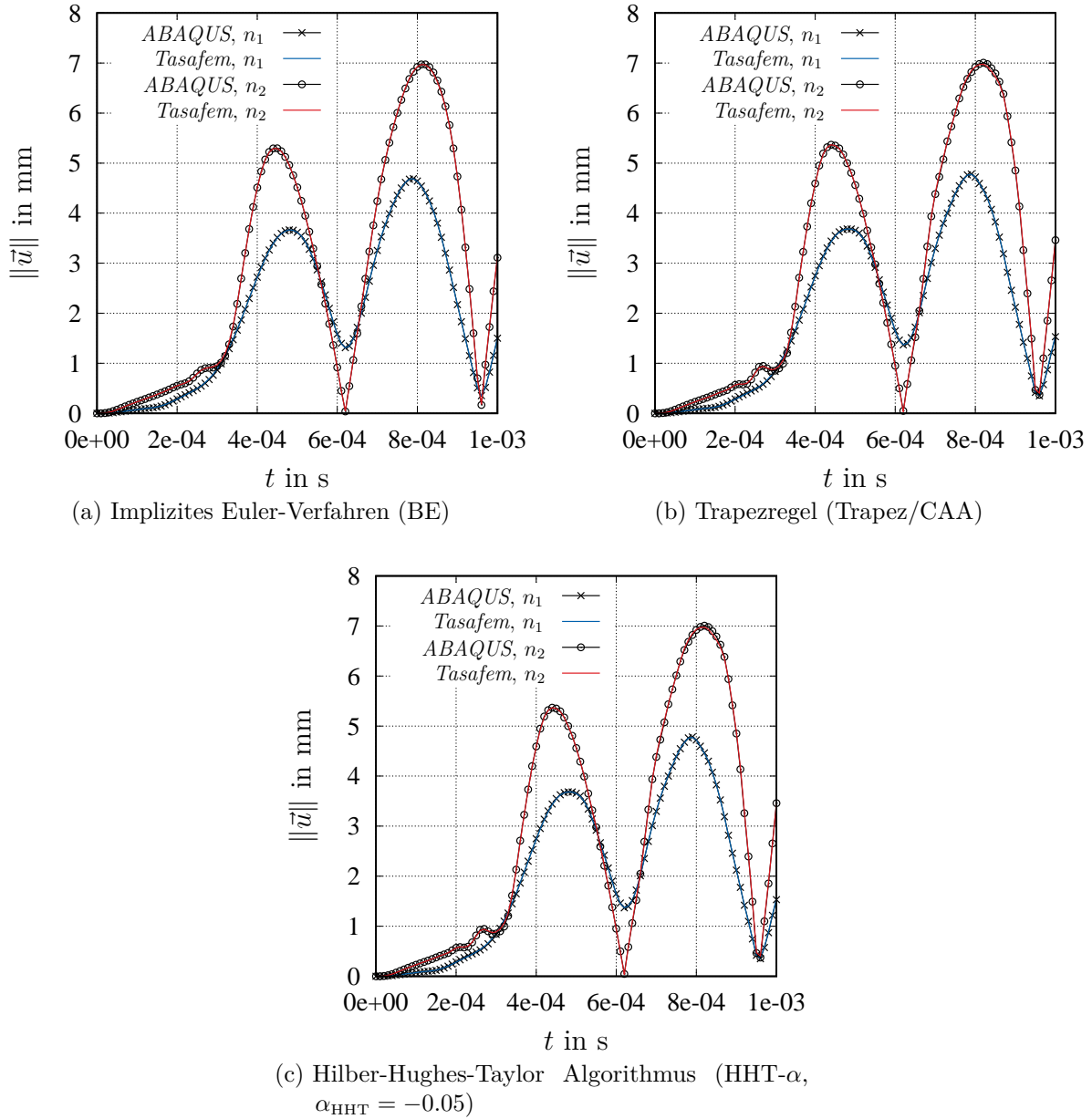


Abbildung 6.20: Verifikation von *Tasafem* und *ABAQUS* anhand der schwach-inkompressiblen, hyperelastischen Elastomerprobe mit verschiedenen Zeitintegratoren (BE, Trapez/CAA, HHT- α) und konstanter Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-6}$ s - Darstellung der ausgewerteten Verschiebungsantwort in den Knoten n_1 und n_2

hierdurch induzierten Zerlegung des Spannungszustands, siehe Gl. (2.200), ein Einsatz der gemischten Q2P1-Elemente zulässig ist. Des Weiteren impliziert die gewählte Vernetzung, siehe Abb. 6.16a, in Kombination mit den an den $n_i = n^e \times n_{\text{GP}}^e$ Gauß-Punkten definierten inneren Variablenvektor $\mathbf{q}^e = \mathbf{C}_v \in \mathbb{R}^{n_q}$, $n_q = 6$, für den global assemblierten Spaltenvektor $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ die Dimension $n_Q = n_q \times n_i = 349\,920$. Für das verwendete Stoffmodell vom Evolutionsgleichungstyp aus Abschnitt 2.5.3.2 werden die sechs unabhängigen Komponenten des symmetrischen viskosen Verzerrungstensors $\mathbf{C}_v \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ analog zu Gl. (5.35) in einem symmetrischen Verzerrungsvektor $\mathbf{C}_v \in \mathbb{R}^6$ angeordnet. Zur Gewährleistung einer spannungsfreien Ausgangskonfiguration seien die Anfangsbedingungen für die inneren Variablen $\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$, $\mathbf{q}_0 \in \mathbb{R}^{n_Q}$, durch $\mathbf{C}_v^T(t_0) = \{1, 1, 1, 0, 0, 0\}^T$ an jedem Gauß-Punkt der Struktur vorgegeben.

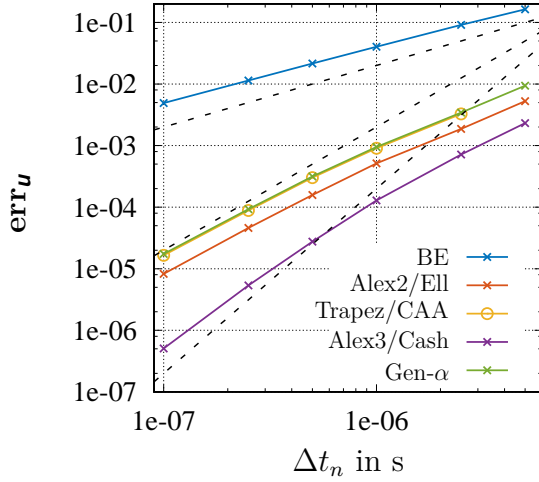
Die Basis für die durchgeführten temporalen Konvergenzstudien der in Tab. D.1 aufgelisteten Integratoren bildet eine numerische Referenzlösung mit dem Alexander/Cash Verfahren (Alex3/Cash) und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-8}$ s. Die zur Berechnung des viskoelastischen Strukturverhaltens konstante Schrittweite Δt_n stammt aus dem limitierten Satz

$$\Delta t_n = \{5 \times 10^{-6} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-6} \text{ s}, 10^{-6} \text{ s}, 5 \times 10^{-7} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-7} \text{ s}, 10^{-7} \text{ s}\}.$$

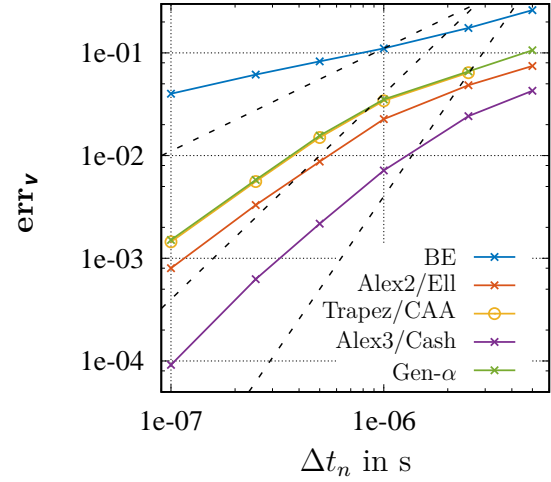
Die Analyse von Abbildung 6.21a ergibt, dass sich alle Verfahren in Bezug auf den Zeitintegrationsfehler im Verschiebungsfeld asymptotisch ihrem theoretischen Konvergenzverlauf annähern. Obwohl infolge der Präsenz eines physikalischen Dämpfungsmechanismus durch das viskoelastische Konstitutivmodell, wie zuvor in Abschnitt 6.1.4 aufgezeigt, eine Verbesserung des Konvergenzverhaltens erwartet wurde, können die theoretischen Konsistenzordnungen der untersuchten Verfahren in den Geschwindigkeiten und inneren Variablen, siehe Abb. 6.21b und 6.21c, nicht präzise wiedergegeben werden. Die mit den Integratoren assoziierten Fehlerkonstanten belegen jedoch, dass Verfahren höherer Ordnung exaktere Genauigkeitsanforderungen bedienen können. Wie außerdem in Abb. 6.21c ersichtlich, kann aufgrund von Rundungsfehlern die Genauigkeit für die Alexander/Cash Methode nach Passieren einer optimalen Schrittweite nicht verbessert werden. Als Folge ist eine degenerierte Konvergenz des Verfahrens zu beobachten.

Um das verschiedenartige Strukturverhalten des viskoelastischen Berechnungsmodells (visco) und des hyperelastischen Berechnungsmodells (hyper) aus dem vorigen Abschnitt 6.1.6 grafisch zu erfassen, zeigt Abb. 6.21d die Reaktionskraft in y -Richtung F_{Ry} an der unteren Fußfläche des Elastomerprobekörpers aufgetragen über der vorgegebenen Verschiebung \bar{u}_y . Der Reaktionskraftvektor $\mathbf{F}_R = \{F_{Rx}, F_{Ry}, F_{Rz}\}^T \in \mathbb{R}^3$ resultiert aus der Summe über alle Knotenkräfte, welche als konjugierte Kraftgröße an Knoten mit Verschiebungsrandbedingungen vorliegen, an der unteren Symmetrieebene bei $y = 0$. Weitere Informationen zur Berechnung von knotenweise definierten Reaktionskräften im Rahmen einer Verschiebungssteuerung sind in [Hartmann, 2003; Hartmann et al., 2008b; Hartmann und Hamkar, 2010] zu finden. Zur Verdeutlichung des Massenträgheitseinflusses wurden zusätzlich entsprechende quasistatische Berechnungen durchgeführt.²² Zur Inkrementierung der Zeitskala verwenden alle Simulationen das Alexander/Cash Verfahren mit einer konstanten Zeitschrittweite $\Delta t_n = 5 \times 10^{-7}$ s. Unter Beschränkung zunächst

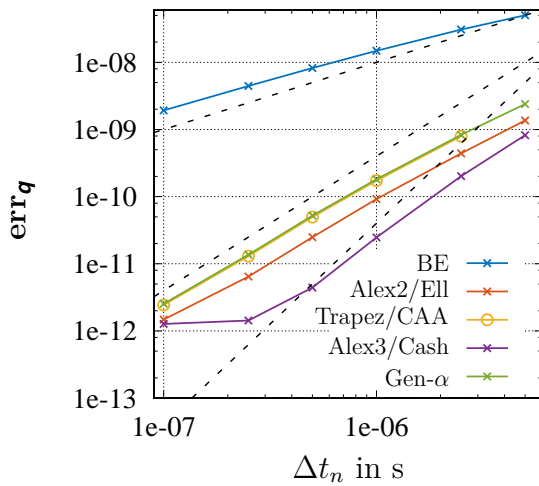
²²In Abb. 6.21d sind die quasistatischen Berechnungen durch die Abkürzung „sta.“ und die strukturdynamischen Simulationen mit „dyn.“ gekennzeichnet.



(a) Globaler Fehler der Verschiebungen



(b) Globaler Fehler der Geschwindigkeiten



(c) Globaler Fehler der inneren Variablen

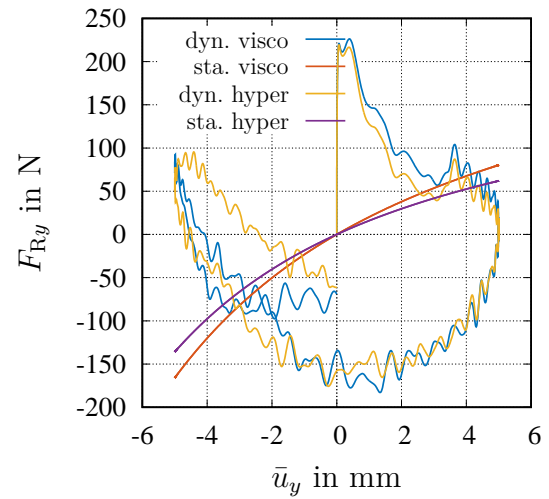

(d) Reaktionskraft F_{Ry} an unterer Symmetrieebene bei $y = 0$ über aufgebrachter Verschiebung \bar{u}_y

Abbildung 6.21: Ordnungsdiagramme für Elastomerprobe, modelliert mit Konstitutivmodell der finiten Viskoelastizität - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v und \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n ; Vergleich Reaktionskraft-Verschiebungskennlinien für quasistatische und dynamische Berechnungen (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 5 \times 10^{-7}$ s) mit hyperelastischen bzw. viskoelastischen Konstitutivmodell

auf die quasistatischen Berechnungen (sta. visco, sta. hyper) zeigt sich, dass das ratenabhängige Materialmodell zu einer Überhöhung der Reaktionskraft führt. Eine markante Überspannungshysteresse infolge der sinusförmigen Beanspruchung tritt allerdings nicht auf. Daher ist mit Blick auf die dynamischen Simulationen (dyn. visco, dyn. hyper) die beobachtete Hysteresse auf die Trägheitseigenschaften der Probe zurückzuführen, welche eine deutliche Aufstockung der Reaktionskraft im Zugbereich induzieren. Darüber hinaus bewirkt der physikalische Dämpfungsmechanismus des finiten Viskoelastizitätsmodells eine Filterung der in F_{Ry} enthaltenen hochfrequenten Oberschwingungen.

6.1.8 Vibrierender linear-elastischer Kragträger

Im folgenden numerischen Beispiel soll das freie Schwingungsverhalten eines am linken Ende einseitig eingespannten, waagerechten Balkens (Kragarm), dessen Querschnitt ein vereinfachtes I-Profil²³ (IPE 200) ist, analysiert werden, siehe Abb. 6.22. Darüber hinaus

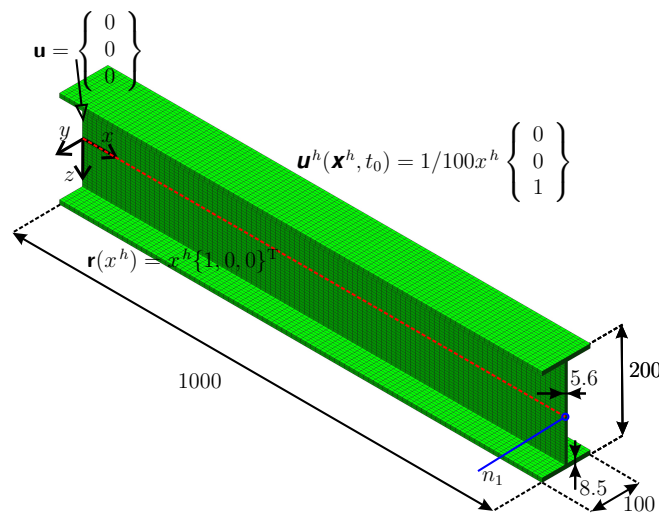


Abbildung 6.22: FE-Modell mit Abmessungen und aufgetragenen Randbedingungen eines Doppel-T-Trägers aus Stahl

ist eine weitere Intention dieses Abschnitts, das im Anhang D.4 vorgestellte Geometrie orientierte Konzept zur numerischen Zeitintegration, welches die Energieerhaltung als nachgeschalteten Projektionsschritt einbezieht, auf das vorliegende mechanische System anzuwenden. Um ein konservatives, dynamisches System zu erhalten, welches den Gesetzen der Hamiltonschen Dynamik unterworfen ist, wird das Materialverhalten des Stahlträgers durch das Hookesche Gesetz, siehe Abschnitt 2.5.3.4, modelliert. Die zwei unabhängigen Materialparameter sind durch den Kompressionsmodul $K = 5 \times 10^5 / 3 \text{ N mm}^{-2}$ und den Schubmodul $G = 7.69 \times 10^4 \text{ N mm}^{-2}$ festgelegt.²⁴ Die in das System eingebrachte mechanische Gesamtenergie, die eine Invariante oder ein sogenanntes erstes Integral des

²³Bei dem Querschnitt des Trägers handelt es sich um ein mittelbreites I- bzw. Doppel-T-Profil mit parallelen Innenflächen der Flansche (IPE-Reihe) nach DIN 1025-5.

²⁴Mit der Umrechnungstabelle 2.11 ergibt sich äquivalent für K und G das Materialparameterpaar, bestehend aus Elastizitätsmodul E und Querkontraktionszahl ν , zu $E \approx 2 \times 10^5 \text{ N mm}^{-2}$ und $\nu = 0.3$.

Hamiltonschen Systems repräsentiert,²⁵ resultiert aus der zum Initialisierungszeitpunkt $t_0 = 0$ s applizierten Anfangsauslenkung $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = 1/100 \mathbf{x}^h \{0, 0, 1\}^T$. Für die Anfangsbedingungen des Geschwindigkeitsfeldes gilt $\dot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm s}^{-1}$. Die Bestimmung der Anfangsbeschleunigung $\ddot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{N}_{\text{ua}} \ddot{\mathbf{u}}_a(t_0)$, $\ddot{\mathbf{u}}_a^T = \{\ddot{\mathbf{u}}^T, \ddot{\mathbf{u}}^T\}$, $\mathbf{a}_0 := \ddot{\mathbf{u}}(t_0)$, erfolgt durch Auswertung von

$$\mathbf{M} \mathbf{a}_0 = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}_0, t_0) - \bar{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(t_0),$$

mit einer konsistenten Massenmatrix. Aufgrund der Fixierung des Trägers entfällt der Term $\bar{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{0}$. Zum Aufstellen der konsistenten Trägheitsmatrix wird die Massendichte $\varrho = 7.836 \times 10^{-9} \text{ t mm}^{-3}$ herangezogen. Das in Abb. 6.22 visualisierte FE-Modell setzt sich aus $n^e = 11\,200$ quadratischen Hexaeder-Elementen (Hex20) und $n^n = 68\,591$ Knoten zusammen. Die gewählte Vernetzung verfügt somit über $n_{\text{uu}} = 204\,300$ unbekannte Verschiebungsfreiheitsgrade und $n_{\text{up}} = 1473$ durch Verschiebungsrandbedingungen gesperrte Freiheitsgrade. Zudem kann davon ausgegangen werden, dass der gewählte Vernetzungsgrad für die äquidistante Raumdiskretisierung ausreicht, um die wesentlichen Eigenschwingungsformen des mathematischen Modells abzubilden.

Zur Untersuchung des Vibrationsverhalten der Struktur werden zwei zeitadaptive Berechnungen mit dem eingebetteten Alexander/Ellsiepen Integrator (Alex2/Ell) einmal mit (Alex2/Ell, proj.) und ohne (Alex2/Ell, no proj.) nachgeschalteten Projektionsschritt durchgeführt. Der verwendete Kontrollparametersatz, einschließlich der benutzten absoluten und relativen Fehlertoleranzen, für eine adaptive Schrittweitensteuerung mit dem Standardregler, siehe Abschnitt 5.2.5, listet Tab. 6.4 auf.²⁶ Eine

Tabelle 6.4: Parametrisierung des verwendeten Standardreglers zur automatischen Schrittweitensteuerung, vgl. Abschnitt 5.2.5

ε_a^u	ε_a^v	ε_r^u	ε_r^v	f_{safety}	f_{max}	f_{min}	\hat{f}_{min}	\hat{f}_{max}
10^{-3} mm	$10^{-3} \text{ mm s}^{-1}$	10^{-3}	10^{-3}	0.85	2.5	0.3	1.0	1.2

anhand eines einfachen eindimensionalen Euler-Bernoulli-Balkenmodells mit dem Elastizitätsmodul $E = 2 \times 10^5 \text{ N mm}^{-2}$, der Länge $L = 10^3 \text{ mm}$, der Querschnittsfläche $A = 2.725 \times 10^3 \text{ mm}^2$, dem Flächenträgheitsmoment $I_{yy} = 1.85 \times 10^7 \text{ mm}^4$ und der Masendichte $\varrho = 7.85 \times 10^{-9} \text{ t mm}^{-3}$ angefertigte Überschlagsrechnung, siehe [Gross et al., 2014, S. 242–249] für weitere Erläuterungen, ergibt das diskrete Eigenschwingungsfrequenzspektrum

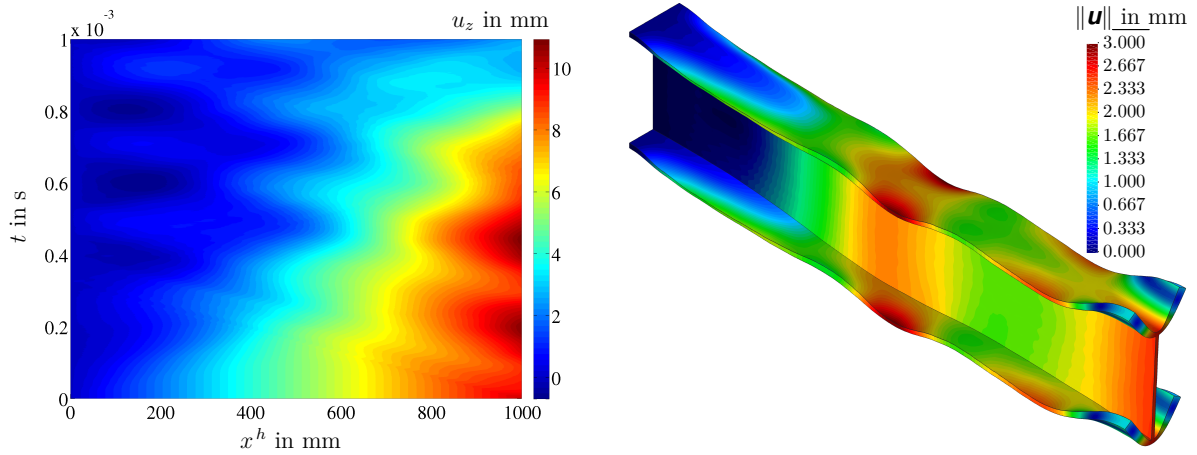
$$f_k = \frac{(\gamma_k L)^2}{2\pi} \sqrt{\frac{EI_{yy}}{\varrho AL^4}}, \quad \text{mit} \quad 1 + \cos(\gamma_k L) \cosh(\gamma_k L) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \infty. \quad (6.29)$$

²⁵Wenn keine explizite Zeitabhängigkeit durch z. B. zeitabhängige Randbedingungen vorliegt, entspricht die sogenannte Hamilton-Funktion des Systems der Gesamtenergie.

²⁶Es werden nur die in Tab. 6.4 aufgeführten Fehlertoleranzen ε_a^u , ε_r^u , ε_a^v , ε_r^v benötigt, da es sich um rein strukturdynamische Simulationen handelt. Des Weiteren ergibt sich analog zu Gl. (5.193) der maximale Fehler e_m aus $e_m = \max(e_u, e_v)$. Die Fehlermaße e_Θ und e_q sind für das konkrete numerische Beispiel nicht definiert und daher belanglos.

Bereits bei der Betrachtung der ersten zwei Eigenfrequenzen $f_1 \approx 232.73 \text{ s}^{-1}$ und $f_2 \approx 1454.5 \text{ s}^{-1}$ wird ersichtlich, dass die Integration der Bewegung des Kragarms nur in einem sehr kurzen Zeitintervall $[t_0, t_e]$ möglich ist. Die Wahl fällt daher auf $t_0 = 0 \text{ s}$, $t_e = 10^{-3} \text{ s}$.

Zur Visualisierung des freien Schwingungsverhaltens illustriert Abb. 6.23b exemplarisch für die Berechnung mit dem Alex2/Ell-Verfahren ohne nachgeschalteten Projektionsschritt (Alex2/Ell, no proj.) zum Zeitpunkt $t = t_e = 10^{-3} \text{ s}$ das Verschiebungsfeld, aufgetragen auf der um einen Skalierungsfaktor $\alpha_u = 15$ vergrößerten, deformierten Struktur. Die Extraktion mannigfacher Informationen ermöglicht das Weg-Zeit-

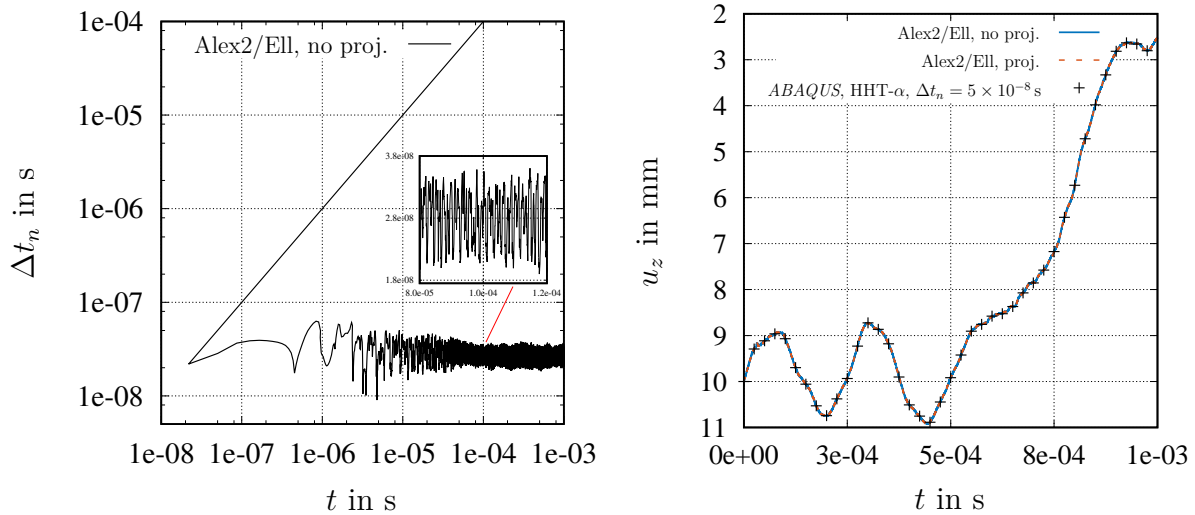


(a) Weg-Zeit-Verschiebungsdiagramm der Profilmittellinie, siehe Abb. 6.22, für $0 \text{ mm} \leq x^h \leq 10^3 \text{ mm}$ und $0 \text{ s} \leq t \leq 10^{-3} \text{ s}$ (b) Verschiebungsfeld, aufgetragen auf einer um Faktor $\alpha_u = 15$ skalierten, deformierten Struktur

Abbildung 6.23: Darstellung des Weg-Zeit-Verschiebungsdiagramms für die Profilmittellinie $\mathbf{r}(x^h) = x^h \{1, 0, 0\}^T$; Visualisierung des Verschiebungsfelds zum Zeitpunkt $t = 10^{-3} \text{ s}$ - Generierte Berechnungsergebnisse basierend auf einer zeitadaptiven Simulation mit dem Alex2/Ell-Verfahren ohne nachgeschalteten Projektionsschritt (Alex2/Ell, no proj.)

Verschiebungsdiagramm 6.23a, bei dem die Verschiebungskomponente in z -Richtung entlang der Profilmittellinie $\mathbf{r}(x^h) = x^h \{1, 0, 0\}^T$ über das komplette Zeitintervall $[t_0, t_e]$ dargestellt ist. Abb. 6.23a verdeutlicht, dass ein hoch transienter Prozess abläuft. Die zugehörige Entwicklung der Schrittweiten, welche durch die adaptive Schrittweitenkontrolle ermittelt wurden, zeigt Abb. 6.24a. Aufgrund scharf eingestellter Fehlertoleranzen für das Geschwindigkeitsfeld ε_a^v und ε_r^v resultieren sehr kleine Schrittweiten in der Größenordnung eines expliziten Zeitintegrators. Von insgesamt $N = 36\,568$ Zeitinkrementen werden jedoch lediglich 16 Zeitschritte verworfen. Konforme Aussagen lassen sich auf die zeitadaptive Berechnung mit dem Alex2/Ell-Verfahren und einem nachgeschalteten Projektionsschritt (Alex2/Ell, no proj.) übertragen. Da der infolge der Projektion resultierende Fehler in der Größenordnung des lokalen Diskretisierungsfehlers liegt, wird hierdurch die automatische Schrittweitensteuerung nur geringfügig beeinflusst. Die Anzahl der durchlaufenen Zeitinkremente wächst nur unwesentlich auf $N = 36\,640$ an.

Zur Verifikation der Berechnungsergebnisse der zwei zeitadaptiven Simulationen wird



(a) Schrittweitenverhalten für zeitadaptive Berechnung mit dem eingebetteten Alex2/Ell-Integrator ohne nachgeschalteten Projektionsschritt (Alex2/Ell, no proj.) und automatischer Zeitschrittkontrolle mittels Standardregler

(b) Ausgewertete Verschiebungsantwort in z -Richtung am Knoten n_1

Abbildung 6.24: Darstellung der resultierenden Schrittweitensequenz (Alex2/Ell, no proj. mit Standardregler); Verifikation von *Tasafem* und *ABAQUS* - Visualisierung des freien Schwingungsverhaltens im Knoten n_1

analog zu den Abschnitten 6.1.5 und 6.1.6 auf den kommerziellen FEM-Löser *ABAQUS/Standard* zurückgegriffen. Für die Zeitdiskretisierung in *ABAQUS/Standard* findet der Hilber-Hughes-Taylor Algorithmus (HHT- α , $\alpha_{\text{HHT}} = -0.05$), siehe Tab. 5.7, mit einem konstantem Zeitschritt $\Delta t_n = 5 \times 10^{-8} \text{ s}$ Anwendung.²⁷ Abb. 6.24b zeigt für die drei durchgeführten Berechnungen die am Knoten n_1 , welcher sich am rechten Ende der Profilmittellinie bei $\mathbf{X}_{n_1} = \mathbf{r}(L)$ befindet, ausgewertete Verschiebungskennlinie über der Zeit. Die hervorragende Übereinstimmung zwischen den beiden Simulationswerkzeugen ist offensichtlich.

Der Blick auf die Energiebilanz des konservativen Systems in Abb. 6.25a lässt den Nutzen der nachgeschalteten Projektionsmethode, welche die Energieerhaltung als algebraischen Zwang einbezieht, erkennen. Wie bereits in Abschnitt 6.1.1 dargelegt, kann für die Berechnungen mit den numerisch dissipativen Verfahren (Alex2/Ell, no proj.; *ABAQUS*, HHT- α , $\Delta t_n = 5 \times 10^{-8} \text{ s}$) das Verhältnis von totaler mechanischer Energie $E_{\text{tot}}(t)$ zur Anfangsenergie $E_{\text{tot}0}$ nicht auf den Wert Eins eingefroren werden. Nur die

²⁷Die automatische Steuerung des Zeitschritts in *ABAQUS/Standard* im Rahmen implizierter Zeitintegration gründet auf einem von Hibbitt und Karlsson [1979] eingeführten Konzept, welches als Basis zur Approximation eines Zeitintegrationsfehlers das sogenannte „half-increment residual“ verwendet. Durch Abschätzung eines Gleichgewichtsresiduums in der Mitte des Zeitinkrements kann der Zeitschritt adaptiv an die geforderte Lösungsgenauigkeit angepasst werden. Da diese Technik keine Gemeinsamkeiten mit der in der vorliegenden Arbeit verwendeten automatischen Schrittweitensteuerung, basierend auf einem eingebetteten lokalen Fehlerschätzer, aufweist, waren vergleichbare zeitadaptive Berechnungen mit *ABAQUS/Standard* nicht realisierbar.

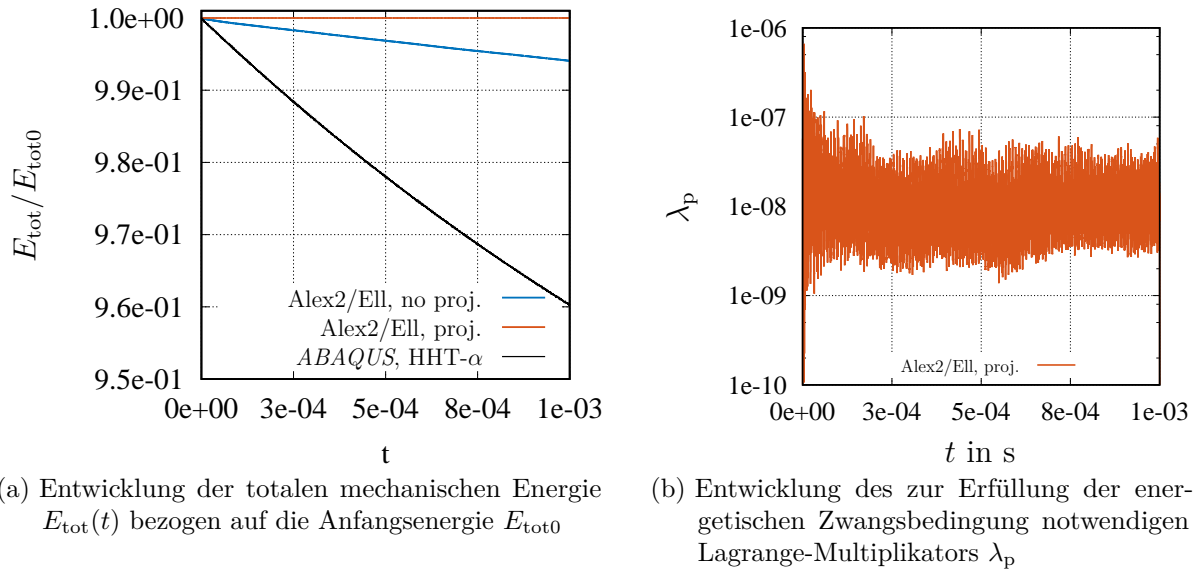


Abbildung 6.25: Gegenüberstellung der energetischen Kurvenverläufe $E_{\text{tot}}(t)/E_{\text{tot0}}$ von Berechnungen mit algorithmisch dissipativen Integratoren (Alex2/Ell, no proj.; ABAQUS, HHT- α , $\Delta t_n = 5 \times 10^{-8}$ s) sowie von einer Berechnung mit numerisch dissipativen Basisalgorithmus und nachgeschaltetem Projektionsschritt (Alex2/Ell, proj.); Visualisierung des Lagrange-Multiplikatorverlaufs λ_p für die Berechnung (Alex2/Ell, proj.)

Simulation mit der Projektionsmethode, dessen Rechenzeit im Vergleich zu einer Berechnung ohne Projektion nahezu konstant bleibt, ist in der Lage, die Hamilton-Funktion an den diskreten Zeitpunkten innerhalb einer relativen Genauigkeit von $e_{E_{\text{tot}}} \in [10^{-6}, 10^{-7}]$, mit $e_{E_{\text{tot}}} = E_{\text{tot}}/E_{\text{tot0}} - 1$, zu konservieren.²⁸ Aus der Gegenüberstellung der Berechnungen mit dem Alex2/Ell-Integrator wird deutlich, dass die Abweichungen in $E_{\text{tot}}/E_{\text{tot0}}$ unterhalb von einem Prozent liegen. Obwohl das algorithmisch dissipative Basisverfahren mit dem nachgeschalteten Projektionsschritt über die gleiche bemerkenswerte charakteristische Eigenschaft wie das zugehörige Kontinuumsproblem, nämlich die Konservierung der totalen Energie, verfügt, kann eine überzeugende Verbesserung hinsichtlich Stabilität oder Genauigkeit nicht festgestellt werden. Für das betrachtete Beispiel des vibrierenden Kragarms wäre also die Verfolgung einer konventionellen Vorgehensweise, d. h. einer zeitadaptiven Berechnung mit dem Alex2/Ell-Integrator, ausreichend.

Die Entwicklung des zur Erfüllung der energetischen Zwangsbedingung

$$\hat{C}_E(\lambda_p) = e_{E_{\text{tot}}}(\lambda_p) = 0 \quad (6.30)$$

notwendigen skalaren Lagrange-Multiplikators λ_p veranschaulicht Abb. 6.25b. Unter der Annahme, dass die Lösung der quadratischen Gleichung (6.30) zwei reellwertige Nullstellen λ_{p1} und λ_{p2} besitzt, wird zur Limitierung der Korrektur der entdimensionierten

²⁸Infolge der in das Geometrie orientierte Konzept einfließenden Approximation (D.28), welche jedoch eine erhebliche Reduktion des Berechnungsaufwands impliziert, ist eine exakte Konservierung der Energie im Rahmen der numerischen Genauigkeit nicht realisierbar.

Lösungsvektoren $\mathbf{u}_{n+1}/\hat{u}_{\text{dim}}$ und $\mathbf{v}_{n+1}/\hat{v}_{\text{dim}}$, mit $\hat{u}_{\text{dim}} = 10^1 \text{ mm}$ und $\hat{v}_{\text{dim}} = 1 \text{ mm s}^{-1}$, der betragsmäßig kleinste Lagrange-Multiplikator, d. h. $\lambda_p = \min(|\lambda_{p1}|, |\lambda_{p2}|)$ ausgewählt. Obwohl dies aus Sicht des Autors die plausibelste Wahl für λ_p darstellt, sind starke Oszillationen im Verlauf des Lagrange-Multiplikators in Abb. 6.25b zu beobachten. Die Qualität bzw. Genauigkeit der Simulationsergebnisse bleibt hiervon unberührt. Für eine detaillierte Analyse dieser Oszillationen bedarf es allerdings noch weiterer Untersuchungen.

6.2 Thermomechanisch gekoppelte Berechnungen der Strukturdynamik ohne Kontakt

Die vorhergehenden Untersuchungen werden nun auf transiente thermomechanisch gekoppelte Feldprobleme erweitert. Wie zuvor liegt dabei der Fokus auf der Analyse des temporalen Fehlerverhaltens für die behandelten Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung vom Runge-Kutta-Typ und der Generalized- α Methode.

6.2.1 Thermoelastischer Stab

Zum Studium von thermisch induzierten Wellenausbreitungsphänomenen in einem eindimensionalen geometrisch linearen Stabkontinuum wird ein Berechnungsmodell gemäß Abb. 6.26 gewählt. Das mathematische Modell unterliegt analog zu dem Beispiel aus

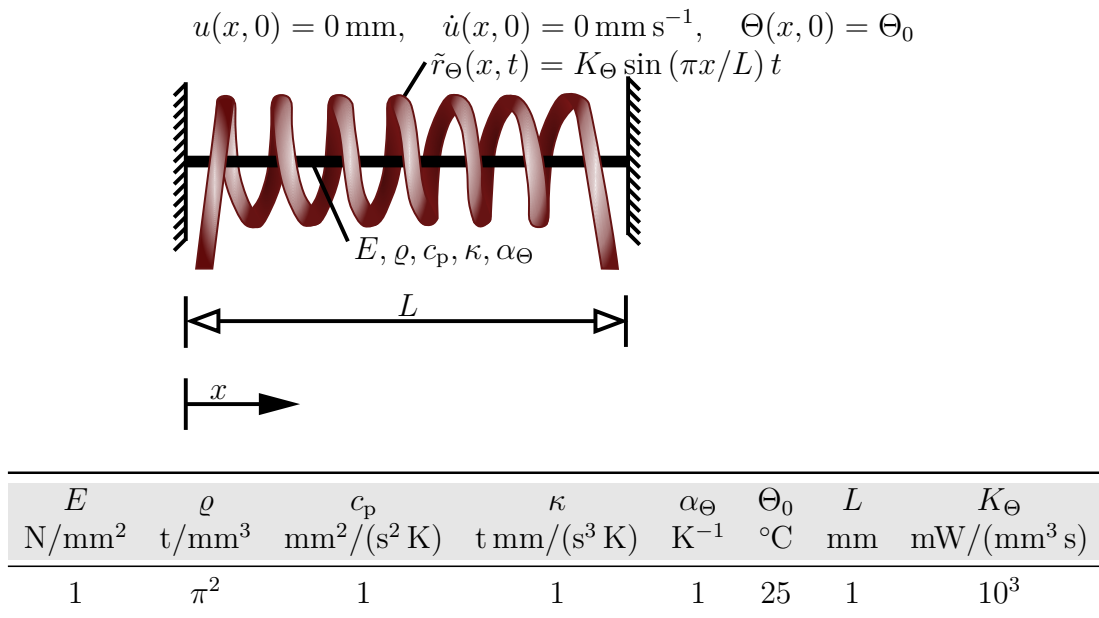


Abbildung 6.26: Thermomechanisch gekoppeltes Berechnungsmodell eines beidseitig eingespannten, thermoelastischen Stabes unter dem Einfluss einer volumetrischen Wärmequelle $\tilde{r}_\Theta(x, t) = K_\Theta \sin(\pi x/L) t$

Abschnitt 6.1.3 einer Beschreibung durch die auf 1D reduzierte Impulsbilanz

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} + n(x, t) = \rho(x) A(x) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}. \quad (6.31)$$

Darüber hinaus vereinfacht sich Gl. (6.31) aufgrund der Annahme einer konstanten Massendichte $\rho(x) = \text{const.}$ und einer konstanten Querschnittsfläche $A = \text{const.}$ sowie durch die Abwesenheit einer axialen Streckenlast $n(x, t) = 0$ zu

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} = \rho A \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}. \quad (6.32)$$

Die geometrisch lineare Theorie induziert die kinematische Aussage

$$\varepsilon(x, t) = \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}. \quad (6.33)$$

Die Modellierung des homogenen Stabmediums erfolgt durch das in Abschnitt 2.5.3.6 spezifizierte thermoelastische Konstitutivmodell, dessen Gültigkeitsbereich sich auf die Theorie kleiner Deformationen beschränkt. Die Reduktion der mechanischen Materialgleichungen auf eine eindimensionale Problemstellung führt auf die Aussagen

$$\varepsilon(x, t) = \varepsilon_M(x, t) + \varepsilon_\Theta(x, t), \quad \varepsilon_\Theta(x, t) = \alpha_\Theta \vartheta(x, t) = \alpha_\Theta (\Theta(x, t) - \Theta_0), \quad (6.34)$$

$$N(x, t) = \sigma(x, t)A = EA\varepsilon_M(x, t) = EA(\varepsilon(x, t) - \varepsilon_\Theta(x, t)), \quad (6.35)$$

wobei zur Berechnung der thermischen Dehnung $\varepsilon_\Theta(x, t)$ ein konstanter Wärmeausdehnungskoeffizient α_Θ und eine konstante Referenztemperatur Θ_0 Anwendung finden.²⁹ Die Kombination der Beziehungen (6.32) bis (6.35) liefert schließlich die thermomechanisch gekoppelte Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \alpha_\Theta \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial x} \right), \quad (6.36)$$

mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit $c = \sqrt{E/\rho}$. Zur Beschreibung der Temperaturentwicklung $\Theta(x, t)$ wird die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung

$$\varrho c_p \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \Theta(x, t)}{\partial x^2} + \varrho \hat{p}_\Theta(x, t) + \tilde{r}_\Theta(x, t) \quad (6.37)$$

herangezogen. Die thermischen Materialkonstanten c_p und κ entsprechen der spezifischen Wärmekapazität und der Wärmeleitfähigkeit. Entgegen Gl. (2.246) symbolisiert die Funktion $\tilde{r}_\Theta(x, t) = K_\Theta \sin(\pi x/L)t$ eine pro Volumeneinheit definierte volumetrische Wärmequelle. Der thermoelastische Produktionsterm ist festgelegt durch $\varrho \hat{p}_\Theta(x, t) = -\alpha_\Theta E \dot{\varepsilon}(x, t) \Theta(x, t)$.³⁰ Für zahlreiche Anwendungen fällt jedoch der Summand $\varrho \hat{p}_\Theta(x, t)$ um mehrere Größenordnungen kleiner aus als die verbleibenden Terme auf der rechten Seite von Gl. (6.37) und kann daher zumeist vernachlässigt werden. Die hierdurch induzierte einseitige thermomechanische Kopplung ermöglicht es, aus der partiellen parabolischen Differentialgleichung

$$\varrho c_p \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \Theta(x, t)}{\partial x^2} + \tilde{r}_\Theta(x, t) \quad (6.38)$$

die thermische Feldvariable $\Theta(x, t)$ unabhängig vom Verschiebungsfeld $u(x, t)$ zu bestimmen. Gemäß Abb. 6.26 wird das zu behandelnde Anfangs-Randwertproblem, welches die

²⁹Zur Vermeidung eines unphysikalischen Temperatursprungs zum Initialisierungszeitpunkt $t_0 = 0$ s wird die Anfangstemperatur $\Theta(x, 0) = \Theta_0$ identisch zur Referenztemperatur Θ_0 gewählt.

³⁰Die Kinematik des einaxialen Zugs impliziert den Verzerrungszustand $\mathbf{E}_L = \varepsilon(\vec{e}_x \otimes \vec{e}_x - \nu(\vec{e}_y \otimes \vec{e}_y + \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z))$. Dementsprechend kann die allgemeingültige Beziehung (2.254) für den thermoelastischen Produktionsterm unter Berücksichtigung von $\text{tr} \mathbf{E}_L = \varepsilon(1 - 2\nu)$ und $K = E/(3(1 - 2\nu))$ in den Ausdruck $\varrho \hat{p}_\Theta(\varepsilon, \Theta) = -\alpha_\Theta E \dot{\varepsilon} \Theta$ umgeformt werden.

partiellen Differentialgleichungen (6.36) und (6.38) verknüpft, durch die Anfangsbedingungen

$$u(x, 0) := u_0(x) = 0 \text{ mm}, \quad \dot{u}(x, 0) := v_0(x) = 0 \text{ mm s}^{-1}, \quad \Theta(x, 0) := \hat{\Theta}_0(x) = \Theta_0 \quad (6.39)$$

und die konsistenten Randbedingungen

$$u(0, t) := g_u(t) = 0 \text{ mm}, \quad u(L, t) := h_u(t) = 0 \text{ mm}, \quad (6.40)$$

$$\Theta(0, t) := g_\Theta(t) = \Theta_0, \quad \Theta(L, t) := h_\Theta(t) = \Theta_0 \quad (6.41)$$

vervollständigt.

Eine detaillierte analytische Lösung des dokumentierten Problems findet sich in Anhang E.2. Während in Abb. 6.27 die Temperaturverteilung entlang der Stabachse, d. h. $0 \leq x/L \leq 1$, zu verschiedenen Zeitpunkten innerhalb $t \in [0 \text{ s}, 1 \text{ s}]$ dargestellt ist, zeigt Abb. 6.28a das sich infolge der Massenträgheit des Stabs ausbildende Verschiebungsfeld. Um für das eher akademisch geprägte Beispiel aus Abb. 6.26 den Einfluss der mechanischen Trägheit sichtbar zu machen, ist in Abb. 6.28b die Verschiebungslösung des

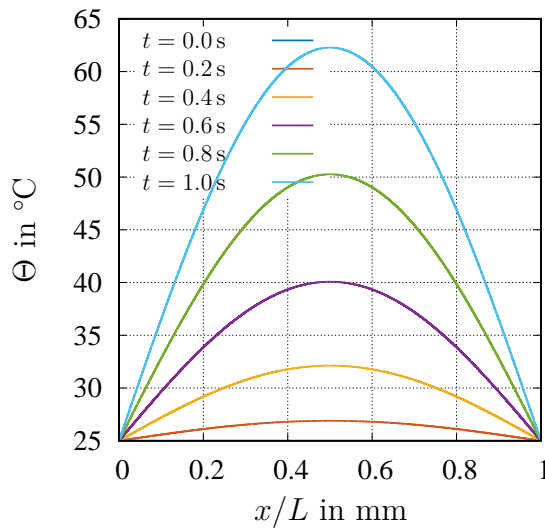


Abbildung 6.27: Temperaturverteilung im Stab zu verschiedenen Zeitpunkten - Entkoppeltes Temperaturfeld, ausgewertet an $t = \{0 \text{ s}, 0.2 \text{ s}, \dots, 1 \text{ s}\}$

kongruenten quasistatischen Problems

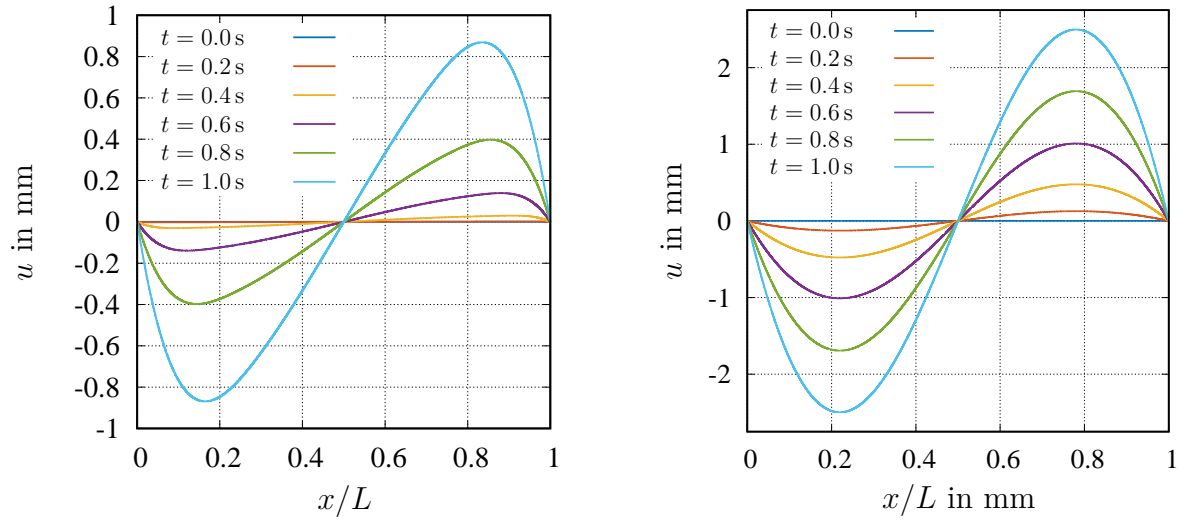
$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial x} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \alpha_\Theta \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial x}, \quad (6.42)$$

$$\rho c_p \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \Theta(x, t)}{\partial x^2} + \tilde{r}_\Theta(x, t), \quad \tilde{r}_\Theta(x, t) = K_\Theta \sin(\pi x/L) t, \quad (6.43)$$

$$u(0, t) := g_u(t) = 0, \quad u(L, t) := h_u(t) = 0, \quad (6.44)$$

$$\Theta(0, t) := g_\Theta(t) = \Theta_0, \quad \Theta(L, t) := h_\Theta(t) = \Theta_0, \quad \Theta(x, 0) := \hat{\Theta}_0(x) = \Theta_0 \quad (6.45)$$

visualisiert, dessen analytische Lösung ebenfalls in Anhang E.2 hinterlegt ist. Aufgrund der weiterhin nur bestehenden einseitigen Kopplung zwischen $u(x, t)$ und $\Theta(x, t)$ ändert



(a) Verschiebungsfeld unter Berücksichtigung von Trägheitseinflüssen, ausgewertet an $t = \{0\text{ s}, 0.2\text{ s}, \dots, 1\text{ s}\}$

(b) Verschiebungsfeld für quasistatische Berechnungen, ausgewertet an $t = \{0\text{ s}, 0.2\text{ s}, \dots, 1\text{ s}\}$

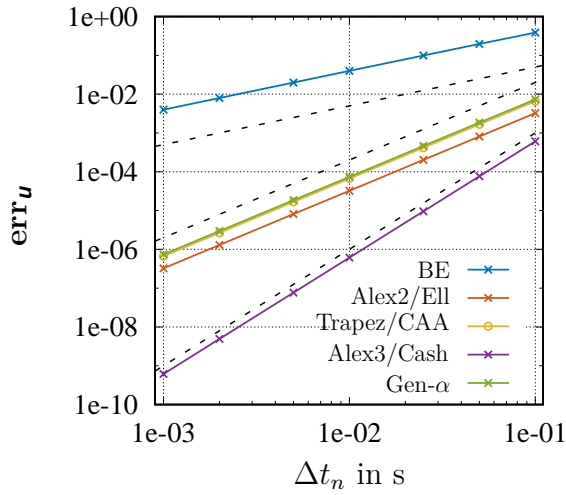
Abbildung 6.28: Gegenüberstellung der dynamischen und quasistatischen Verschiebungsfelder für thermomechanisches Modell aus Abb. 6.26

sich die Lösung des Temperaturfelds nicht. Aus der Gegenüberstellung der Abb. 6.28a und 6.28b ist deutlich ersichtlich, dass sich bei der dynamischen Lösung, siehe Gl. (E.60), im Vergleich zum quasistatischen Ergebnis, siehe Gl. (E.62), die Extrema von $u(x, t)$ zu den Stabenden hin verlagern sowie Amplitudenreduktionen der Minima und Maxima stattfinden. Trivialerweise lässt sich dies mit der dem homogenen Stabmedium zugeordneten Massenträgheit erklären, welche die durch die Wärmeausdehnung des Stabs induzierte Ausbildung des Verschiebungsfelds hemmt.

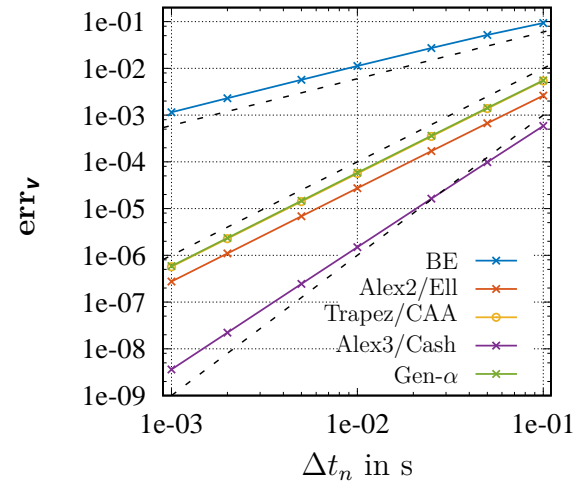
Auf Basis der analytischen Ausdrücke (E.44), (E.60) und (E.61), welche als Referenzlösungen zur Berechnung des numerischen Fehlers im Verschiebungsfeld $u(x, t)$, im Geschwindigkeitsfeld $v(x, t)$ und Temperaturfeld $\Theta(x, t)$ bereitstehen, werden erneut zeitliche Konvergenzstudien für die in Tab. D.1 angegebenen DIRK-Verfahren und die Generalized- α Methode mit den konstanten Zeitschrittweiten

$$\Delta t_n = \{10^{-1}\text{ s}, 5 \times 10^{-2}\text{ s}, 2.5 \times 10^{-2}\text{ s}, 10^{-2}\text{ s}, 5 \times 10^{-3}\text{ s}, 2 \times 10^{-3}\text{ s}, 10^{-3}\text{ s}\}$$

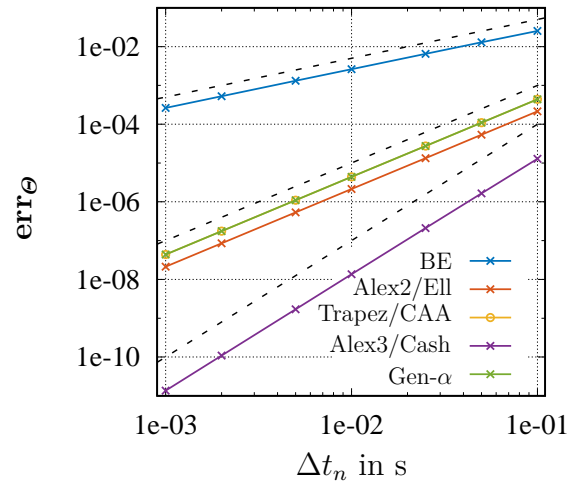
durchgeführt. Für die Generierung der analytischen Lösung wurden 10^4 Reihenglieder in den Gleichungen (E.60) und (E.61) berücksichtigt, die sehr exakte Näherungen repräsentieren. Analog zu den Abschnitten 6.1.3 und 6.1.4 findet eine Vernetzung des Stabs mit $n^e = 10^4$ Lin3-Elementen sowie eine konsistente Massenmatrix zur Abbildung der Trägheit Anwendung. Die Konvergenz der Zeitintegrationsfehler err_Θ , err_u und err_v in Abhängigkeit der Schrittweite Δt_n sind in den Abb. 6.29a bis 6.29c veranschaulicht. Offensichtlich können sämtliche numerische Verfahren in allen betrachteten Feldern ihre theoretische Konvergenzordnung erreichen. Im Rahmen einer neutralen Interpretation dieser zunächst überzeugend erscheinenden Resultate muss allerdings eingestanden werden, dass das thermomechanische gekoppelte Problem 6.26 nur homogene bzw. konstante



(a) Globaler Fehler der Verschiebungen



(b) Globaler Fehler der Geschwindigkeiten



(c) Globaler Fehler der Temperaturen

Abbildung 6.29: Ordnungsdiagramme für thermomechanisches Stabkontinuum - Globale Zeitintegrationsfehler err_u , err_v und err_Θ , aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

Randbedingungen, siehe Gl. (6.40) und (6.41), einbezieht. Ordnungsreduktionen infolge nichtlinearer Randbedingungen sind somit ausgeschlossen. Aus Sicht des Autors ergibt sich hierdurch ein glattes Problem, welches nur moderate Herausforderungen an die analysierten Zeitintegrationsverfahren stellt. In [Rothe et al., 2015b] wird ein vergleichbares thermomechanisch gekoppeltes Stabkontinuum für den quasistatischen Fall betrachtet. Das Konvergenzverhalten der dort analysierten DIRK-Verfahren höherer Ordnung stimmt gleichermaßen mit der Theorie überein.

6.2.2 Thermoelastische Elastomerprobe

In Anlehnung an die Abschnitte 6.1.5 bis 6.1.7 werden zur Verifikation des *Inhouse*-Codes *Tasafem* thermomechanisch gekoppelte Vergleichsrechnungen zwischen *Tasafem* und dem kommerziellen FEM-Programm *ABAQUS* durchgeführt. Die Abbildung 6.30 zeigt das

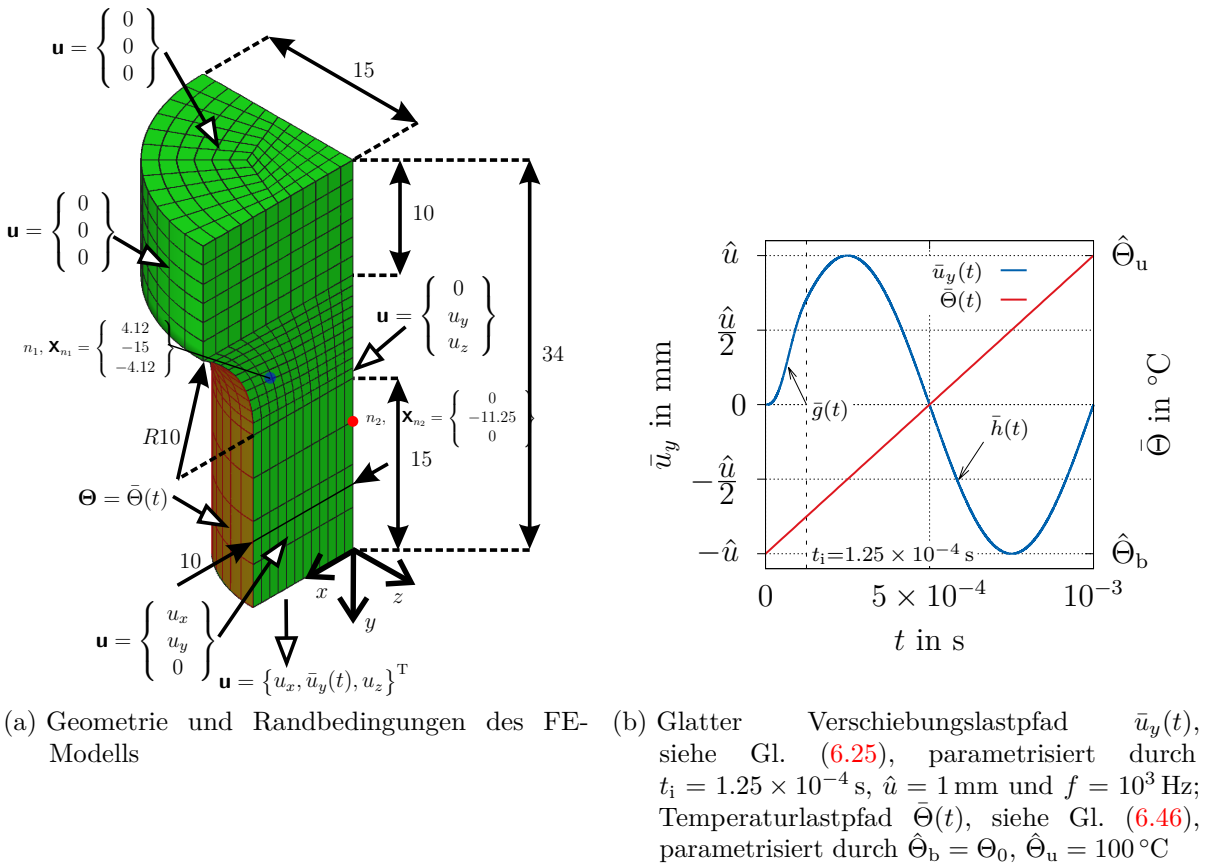


Abbildung 6.30: FE-Modell mit Abmessungen und aufgetragenen Randbedingungen eines rotationssymmetrischen Elastomerprobekörpers; Illustration des Belastungsprozesses

modifizierte FE-Berechnungsmodell und den zugehörigen zu durchlaufenden Belastungsprozess. Neben den bereits in Abschnitt 6.1.3 diskutierten Verschiebungsrandbedingungen wird der untere Teil des Schafts innerhalb $t \in [t_0, t_e]$, $t_0 = 0 \text{ s}$, $t_e = 10^{-3} \text{ s}$, durch eine

lineare Temperaturrandbedingung

$$\bar{\Theta}(t) = \hat{\Theta}_b + \frac{\hat{\Theta}_u - \hat{\Theta}_b}{t_e - t_0} t, \quad (6.46)$$

mit $\hat{\Theta}_u = 100^\circ\text{C}$, aufgeheizt. Das untere Temperaturniveau $\hat{\Theta}_b$ ist auf dem Wert der Referenztemperatur Θ_0 , siehe Tab. 6.5, fixiert, d. h. $\hat{\Theta}_b = \Theta_0$. Die Präzisierung des in Abb. 6.30b illustrierten Lastpfads $\bar{u}_y(t)$, siehe Gl. (6.25), erfolgt durch die Parameter $t_i = 1.25 \times 10^{-4} \text{ s}$, $\hat{u} = 1 \text{ mm}$ und $f = 10^3 \text{ Hz}$. Der zu den Randbedingungen konsistente Anfangszustand ist durch $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm}$, $\dot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm s}^{-1}$ und $\Theta^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \Theta_0$ festgelegt.

Für die Modellierung der Knochenprobe werden die Materialgleichungen der Thermoelastizität bei kleinen Deformationen aus Abschnitt 2.5.3.6 herangezogen, deren Materialparameter in Tab. 6.5 zusammengefasst sind.³¹ Die mechanischen Material-

Tabelle 6.5: Thermoelastische Materialparameter für Konstitutivmodell aus Abschnitt 2.5.3.6

Materialparameter	Symbol	Wert	Einheit
Elastizitätsmodul	E	2.247	N/mm ²
Querkontraktionszahl	ν	0.45	-
Wärmeausdehnungskoeffizient	α_Θ	5×10^{-4}	K ⁻¹
Referenztemperatur	Θ_0	25	°C
Dichte	ϱ	9.2×10^{-10}	Ns ² /mm ⁴
Wärmekapazität	c_p	5.86×10^8	mm ² /(s ² K)
Konduktivität	κ	4×10^4	tmm/(s ³ K)

konstanten $E = 9KG/(3K + G)$ und $\nu = (3K - 2G)/(6K + 2G)$ wurden dabei in Anlehnung an das Berechnungsmodell aus Abschnitt 6.1.5 auf Basis eines Kompressionsmoduls $K = 7.49 \text{ MPa}$ und eines Schubmoduls $G = 7.748 \times 10^{-1} \text{ MPa}$ bestimmt, siehe hierzu auch die Umrechnungstabelle 2.11. Des Weiteren wird die temperaturabhängige Materialfunktion $\hat{c}_p(\Theta)$ in Gl. (2.246) durch eine konstante Wärmekapazität c_p ersetzt.

Der implizite Programm-Code *ABAQUS/Standard* ist nicht in der Lage, thermomechanisch gekoppelte Berechnungen der Strukturodynamik auszuführen. Nur *ABAQUS/Explicit* ermöglicht eine voll gekoppelte thermische Spannungsanalyse unter Einbeziehung von Trägheitseinflüssen. Diesem Umstand Rechnung tragend müssen im Vergleich zu Abschnitt 6.1.5 Anpassungen hinsichtlich der räumlichen Diskretisierung des Berechnungsmodells vorgenommen werden. Innerhalb der quaderförmigen Elementformen ist

³¹Das in diesem Abschnitt modellierte Elastomer mit der in Tab. 6.5 angegebenen Materialparameterspezifikation beschreibt hinsichtlich der thermischen Eigenschaften keinen klassischen Werkstoff, vielmehr wurden die thermischen Materialparameter mit der Intention gewählt, eine ausgeprägte inhomogene Temperaturverteilung im Probekörper zu generieren.

ABAQUS/Explicit auf 8-knotige Hexaeder-Elemente (Hex8) limitiert, sodass nach Übernahme dieser Beschränkung für die in Abb. 6.30a illustrierte Vernetzung $n^e = 2160$, $n^n = 2667$, $n_{uu} = 6751$, $n_{up} = 1250$, $n_{\Theta u} = 2394$ sowie $n_{\Theta p} = 273$ gilt. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass *ABAQUS/Explicit* für lineare Elemente im Gegensatz zu dem in Abschnitt 5.1 beschriebenen Ansatz und den in *Tasafem* zum Einsatz kommenden Elementformulierungen eine konstante Temperaturinterpolation im Elementgebiet verwendet. Die explizite Lösungsprozedur des kommerziellen Simulationswerkzeugs basiert auf der Anwendung des expliziten zentralen Differenzenverfahrens, siehe Tab. D.4, in Kombination mit einer konzentrierten Massenmatrix, welche eine aufwendige Invertierung der Massenmatrix beim Lösen des linearen Gleichungssystems in jedem Zeitschritt überflüssig macht. Die Trägheitseigenschaften des diskretisierten Elastomerprobekörpers werden daher mittels einer konzentrierten Massenmatrix nachgebildet. Für weiterführende Information zu expliziten Zeitintegrationsoperatoren im Rahmen der Finite-Elemente-Methode sei auf Standardliteratur wie z. B. [Hughes, 1983; Hughes, 2000; Belytschko et al., 2000; Bathe, 2002; Wriggers, 2008; Zienkiewicz et al., 2013] verwiesen.

Geschuldet dem Umstand, dass die Berücksichtigung des volumetrischen, thermoelastischen Produktionsterms, siehe Definition (2.254), in *ABAQUS/Explicit* den Einsatz zusätzlicher vom Anwender zu implementierender Unterprogramme nach sich zieht, wird für das behandelte Verifikationsbeispiel auf diesen Term in der verallgemeinerten Wärmeleitungsgleichung (2.246) verzichtet. Es ergibt sich damit analog zu Abschnitt 6.2.1 nur eine einseitige Kopplung zwischen dem Temperatur- und Verschiebungsfeld, die aus der thermischen Ausdehnung des Materials resultiert. Detailliertere Informationen zu *ABAQUS/Explicit* können der Dokumentation [Systèmes, 2014] entnommen werden.

Die Generierung der Berechnungsergebnisse in *Tasafem* erfolgt mit dem impliziten Euler-Verfahren und dem DIRK-Integrator nach Alexander/Ellsiepen sowie einem konstanten Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-6}$ s. Als repräsentativer Ausschnitt der Simulationsergebnisse wird die thermisch-mechanische Strukturantwort an den Knoten n_1 und n_2 , welche sich an den Positionen \mathbf{X}_{n_1} und \mathbf{X}_{n_2} befinden, siehe Abb. 6.30a, ausgewertet. Die Abbildungen 6.31a und 6.31b zeigen die an den Punkten n_1 und n_2 resultierenden Temperaturverläufe, die auf eine ausgezeichnete Übereinstimmung beider Simulationswerkzeuge schließen lassen. Weiterhin sind in den Abb. 6.32a und 6.32b für n_1 und n_2 die Entwicklung der Verschiebung über der Zeit veranschaulicht. Es ist offensichtlich, dass hier keine absolute Konformität zwischen den Berechnungen mit *ABAQUS/Explicit* und *Tasafem* vorliegt. Dennoch kann der qualitative Verschiebungsverlauf korrekt abgebildet werden. Es wird vermutet, dass die Kombination aus expliziter Zeitintegration, die im Vergleich zu *Tasafem* differierende Elementformulierung sowie eine bisher nicht erwähnte Interpolation des Lastpfades, siehe Gl. (6.25), durch eine vorgegebene Wertetabelle zu den dargestellten Abweichungen zwischen den beiden Simulationswerkzeugen führen. Darüber hinaus lassen die nur geringfügig voneinander abweichenden Kurvenverläufe der DIRK-Integratoren BE und Alex2/Ell in Abb. 6.32 auf eine gewisse Konstanz der hauseigenen Verifikationsberechnungen schließen.

Im Rahmen des untersuchten Beispiels bietet es sich an, den Einfluss einer konzentrierten (diagonalen)³² und konsistenten Massenmatrix auf die mechanische Strukturantwort

³²In der englischsprachigen Literatur wird eine diagonalisierte Massenmatrix häufig auch als „lumped

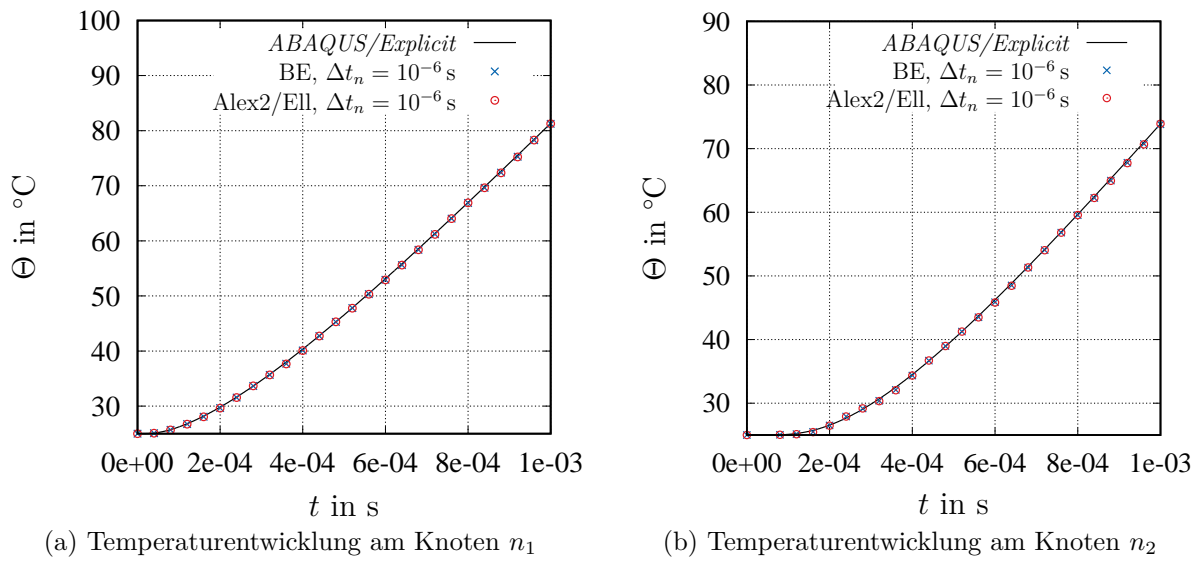


Abbildung 6.31: Verifikation von *Tasafem* unter Verwendung der Zeitintegratoren BE, Alex2/Ell mit konstanter Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-6}$ s und *ABAQUS/Explicit* anhand der thermoelastischen Elastomerprobe - Darstellung der Temperaturentwicklung an den Knoten n_1 und n_2

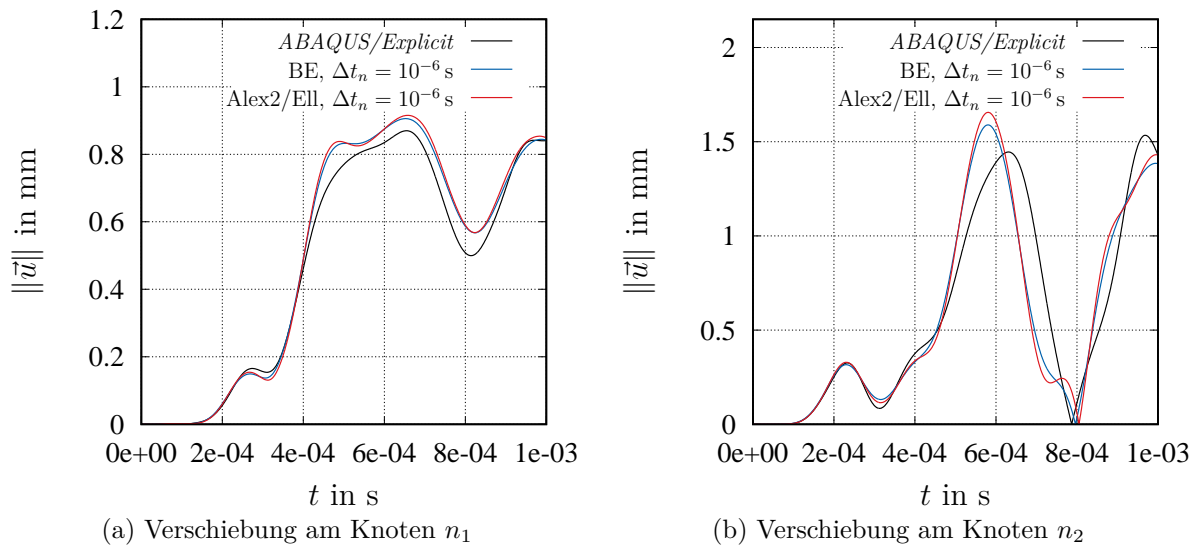
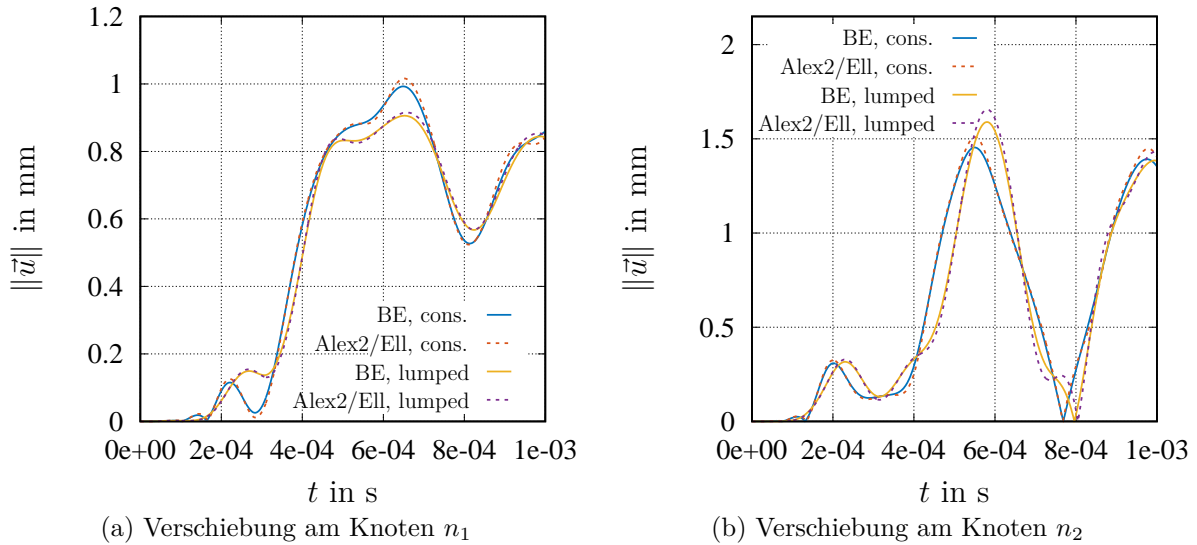


Abbildung 6.32: Verifikation von *Tasafem* unter Verwendung der Zeitintegratoren BE, Alex2/Ell mit konstanter Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-6}$ s und *ABAQUS/Explicit* anhand der thermoelastischen Elastomerprobe - Darstellung der Verschiebungsantwort an den Knoten n_1 und n_2

aufzuzeigen. Abb. 6.33 veranschaulicht die entsprechenden Resultate dieser Untersuchung.



Abbildungung 6.33: Gegenüberstellung von Simulationen mit einer konsistenten und konzentrierten Massenmatrix unter Verwendung der Zeitintegratoren BE, Alex2/Ell mit konstanter Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-6}$ s - Darstellung der Verschiebungsantwort an den Knoten n_1 und n_2

Die auf einer knotenweise definierten Quadraturregel in Gestalt der Trapezregel für lineare Elemente basierende Diagonalmassenmatrix bewirkt für die mit „lumped“ bezeichneten Graphen deutliche Abweichungen von den Kurvenverläufen, welche mit Hilfe einer konsistenten Massenmatrix generiert wurden. Wie Archer [1963] an ausgewählten Beispielen zeigt, beschreibt jedoch die konsistente Massenmatrix eine physikalisch verträglichere Strukturantwort.

6.2.3 Thermoviskoplastische Stahlprobe

Zur Demonstration des temporalen Konvergenzverhaltens der analysierten numerischen Verfahren aus Tab. D.1 im Rahmen dreidimensionaler thermomechanisch gekoppelter, strukturdynamischer Problemstellungen werden an einem nach DIN 50125 genormten Zugprobekörper (Zugprobe DIN 50125 - A 18×90) aus legierten Vergütungsstahl 51CrV4, siehe Abb. 6.34a, innerhalb des betrachteten Zeitintervalls $[0 \text{ s}, 0.1 \text{ s}]$ temporale Konvergenzstudien durchgeführt. Unter Ausnutzung der vorliegenden Rotationssymmetrie für die Stahlzugprobe ist es ausreichend, ein Achtel der Struktur mit 20-knotigen quadratischen Hexaeder-Elementen (Hex20) zu diskretisieren. Bezugnehmend auf die gewählte Vernetzung in Abb. 6.34a ergeben sich $n^e = 2880$, $n^n = 13969$, $n_{uu} = 36463$, $n_{up} = 5444$, $n_{\Theta u} = 13969$, $n_{\Theta p} = 0$. Zur Abbildung der Trägheitseigenschaften der Struktur findet eine konsistente Massenmatrix Anwendung. Neben den Symmetrierandbedingungen an den seitlichen Schnittflächen ist die Mantelfläche des Zylinderkopfs fixiert, wodurch

mass matrix“ bezeichnet.

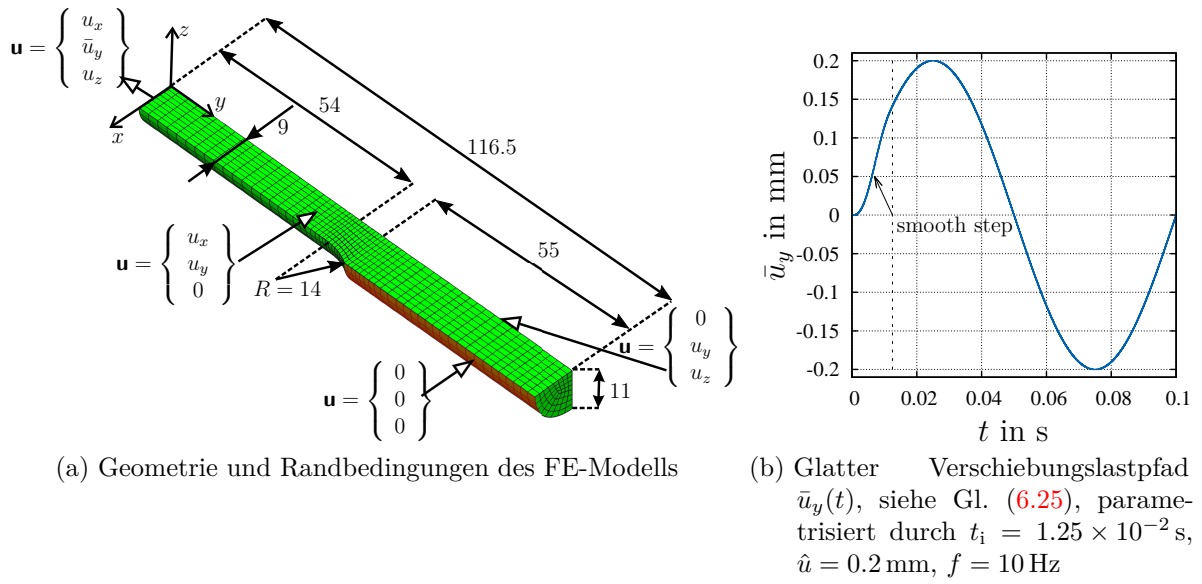


Abbildung 6.34: FE-Modell mit Abmessungen und aufgetragenen Randbedingungen einer rotationssymmetrischen Zugprobe DIN 50125 - A 18 x 90; Darstellung des Lastpfads

das Einspannen der Stahlprobe in eine Zug-Druck-Prüfmaschine imitiert wird. Der Prüfling wird durch das Aufbringen einer sinusförmigen Verschiebungssteuerung, siehe Abb. 6.34b, auf die mittlere Querschnittsfläche belastet. In Analogie zu Abschnitt 6.1.5 wird zur Vermeidung diskontinuierlicher Geschwindigkeits- und Beschleunigungsverläufe zum Initialisierungszeitpunkt $t_0 = 0$ s die Sinusfunktion im Teilintervall $[t_0, t_i]$ durch eine Polynomfunktion fünften Grades $\bar{g}_y(t)$ ³³ ersetzt, welche an der Stelle $t_i = 1.25 \times 10^{-2}$ s im Funktionsverlauf sowie der ersten und zweiten Zeitableitung stetig in die harmonisch oszillierende Belastung übergeht. Darüber hinaus wird gefordert, dass entsprechend den Bedingungen (6.26) eine Initiierung der Belastung aus dem Stillstand heraus erfolgt. Gemäß Gl. (6.25) ist der vollständige Lastpfad aus Abb. 6.34b durch die Parametrisierung $\hat{u} = 0$ mm, $f = 0$ Hz, $t_i = 0.0125$ s und die Polynomkoeffizienten

$$\mathbf{a}^T = \{a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} \approx \{0, 0, 0, 0.926, -1.257, 0.472\} \text{ mm},$$

definiert. Zur Wahrung der Konsistenz zwischen Anfangs- und Randbedingungen zum Initialisierungszeitpunkt t_0 sind die Anfangsverschiebung und deren Zeitableitung durch $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0}$ mm und $\dot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0}$ mm s⁻¹ festgelegt. Des Weiteren liegt zum Startzeitpunkt t_0 eine homogene Anfangstemperaturverteilung $\Theta^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \Theta_0$, mit der konstanten Referenztemperatur $\Theta_0 = 25$ °C, vor.

Für die Materialmodellierung der Stahlzugprobe werden im Rahmen der geometrisch linearen Theorie die Stoffgleichungen der Thermoviskoplastizität aus Abschnitt 2.5.3.7 herangezogen, deren Materialparameter Tab. 6.6 in komprimierter Darstellung auflistet. In Zusammenhang mit dem gewählten Netz und den an den $n_i = n^e \times n_{\text{GP}}^e$ Gauß-Punkten definierten inneren Variablen Vektor $\mathbf{q}^{eT} = \{\mathbf{E}_v^T, \mathbf{E}_r^T\} \in \mathbb{R}^{n_q}$, $n_q = 12$, der für das

³³In Abb. 6.34b ist die Polynomfunktion $\bar{g}_y(t)$ als „smooth step“ Funktion gekennzeichnet.

Tabelle 6.6: Materialparameter in Anlehnung an Quint [2012] für das thermoviskoplastische Konstitutivmodell aus Abschnitt 2.5.3.7 zur Beschreibung des Materialverhaltens eines 51CrV4 Vergütungsstahls

Materialparameter	Symbol	Wert	Einheit
Kompressionsmodul	K	1.6666×10^5	N/mm ²
Steigung K bez. Temperatur	c_K	91	N/(mm ² K)
Schubmodul	G	0.769×10^5	N/mm ²
Steigung G bez. Temperatur	c_G	42	N/(mm ² K)
Wärmeausdehnungskoeffizient	α_Θ	1.2×10^{-5}	K ⁻¹
Verfestigungsparameter	c_X	4230	N/mm ²
Verfestigungsparameter	β	3×10^{-3}	N ⁻¹ mm ⁻²
Anfangsfließspannung	k_0	450	N/mm ²
Fließspannung unter hoher Temperatur	k_H	100	N/mm ²
Exponent in Fließspannungsfunktion	b	4.2×10^{-3}	°C ⁻¹
Viskosität	η	6×10^4	s
Exponent in Regularisierungsfunktion	m	1	-
Normalisierungsfaktor	σ_0	1	N/mm ²
Dichte	ρ	7.836×10^{-9}	Ns ² /mm ⁴
Referenztemperatur	Θ_0	25	°C

verwendete Konstitutivmodell die dissipativen Verzerrungsgrößen $\mathbf{E}_v \in \mathbb{R}^6$ und $\mathbf{E}_r \in \mathbb{R}^6$ enthält, ergibt sich für den global assemblierten Spaltenvektor $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ die Dimension $n_Q = n^e \times n_{GP}^e \times n_q = 933\,120$, mit $n_{GP}^e = 27$.³⁴

Anstatt der Wahl einer spezifischen Wärmekapazitätsfunktion gemäß Gl. (2.271) findet ein von Quint et al. [2011] vorgeschlagener temperaturabhängiger Ansatz, welcher mittels Differential-Scanning-Calorimeter (DSC) Messungen ermittelt wurde, Anwendung. Zur Berücksichtigung von Phasentransformationsvorgängen im Material unter hohen Temperaturen wird ein von Kreisselmeier und Steinhäuser [1979] vorgeschlagenes logarithmisches Interpolationskonzept

$$\hat{c}_p(\Theta) = -c_W \ln \left(\frac{e^{-c_{p1}(\Theta)/c_W} + e^{-c_{p2}(\Theta)/c_W}}{2} \right) \quad (6.47)$$

der zwei Funktionen

$$c_{p1}(\Theta) = a_1 e^{a_2 \Theta} + a_3 \quad \text{und} \quad c_{p2}(\Theta) = a_4 e^{-a_5(\Theta - \bar{\Theta}_0)} + a_6 \Theta \quad (6.48)$$

³⁴In dieser Arbeit nicht gezeigte numerische Experimente bestätigen, dass in Bezug auf die quadratische Vernetzung $n_{GP}^e = 27$ Gauß-Punkte pro Element die monolithische Funktionalmatrix im Rahmen des Linearisierungsprozesses ausreichend exakt räumlich integrieren. Im Vergleich zu einem rein mechanischen Problem bleibt also die Anzahl der Gauß-Punkte pro Element unverändert. Die Aussage ist auch für lineare Hexaeder-Elemente gültig.

benutzt. Die an den DSC-Messungen identifizierten Parameter in SI-Einheiten lauten $a_1 = 34.2 \text{ J}/(\text{kgK})$, $a_2 = 0.0026 \text{ K}^{-1}$, $a_3 = 421.15 \text{ J}/(\text{kgK})$, $a_4 = 956.5 \text{ J}/(\text{kgK})$, $a_5 = 0.012 \text{ K}^{-1}$, $a_6 = 0.45 \text{ J}/(\text{kgK}^2)$ und $\tilde{\Theta}_0 = 900 \text{ K}$.³⁵ Der Wichtungsfaktor c_W der logarithmisch interpolierten Wärmekapazität (6.47) bekommt den Wert $c_W = 30 \text{ J}/(\text{kgK})$ zugewiesen.

Nach [Quint et al., 2011] wird für die temperaturabhängige thermische Konduktivität des 51CrV4 Stahlwerkstoffs ein kubischer Ansatz der Gestalt

$$\kappa(\Theta) = b_0 + b_1\Theta + b_2\Theta^2 + b_3\Theta^3, \quad \text{mit } b_0 = 40.1 \text{ W}/(\text{mK}), \quad (6.49)$$

$$b_1 = 0.05 \text{ W}/(\text{mK}^2), \quad b_2 = -10^{-4} \text{ W}/(\text{mK}^3), \quad b_3 = 4.9 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{mK}^4),$$

gewählt. Aus der angegebenen Parametrisierung für $\kappa(\Theta)$ folgt eine in der SI-Einheit $\text{W}/(\text{mK})$ ausgedrückte Wärmeleitfähigkeit. Die Umrechnung in das in Abschnitt B.5 für die Simulationen zugrunde gelegte Einheitensystem entfällt, da trivialerweise $\text{tmm}/(\text{s}^3\text{K}) = \text{W}/(\text{mK})$ gilt.

Die Grundlage für die Berechnung der temporalen Fehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v , \mathbf{err}_Θ und \mathbf{err}_q , siehe hierzu die Definitionen der Fehlermaße (6.1) und (6.2), zu den zugehörigen Schrittweiten

$$\Delta t_n = \{10^{-2} \text{ s}, 5 \times 10^{-3} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-3} \text{ s}, 10^{-3} \text{ s}, 5 \times 10^{-4} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-4} \text{ s}, 10^{-4} \text{ s}\}$$

bildet eine numerische Referenzlösung mit dem Alexander/Cash Verfahren (Alex3/Cash) und einem konstanten Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-5} \text{ s}$. Diese Kombination aus Alex3/Cash-Integrator, welcher in den durchgeführten Untersuchungen das Zeitintegrationsverfahren mit der höchsten Konsistenzordnung repräsentiert, und dem selektierten Zeitschritt lässt auf den kleinsten Zeitintegrationsfehler schließen. Die Abb. 6.35a und 6.35b veranschauli-

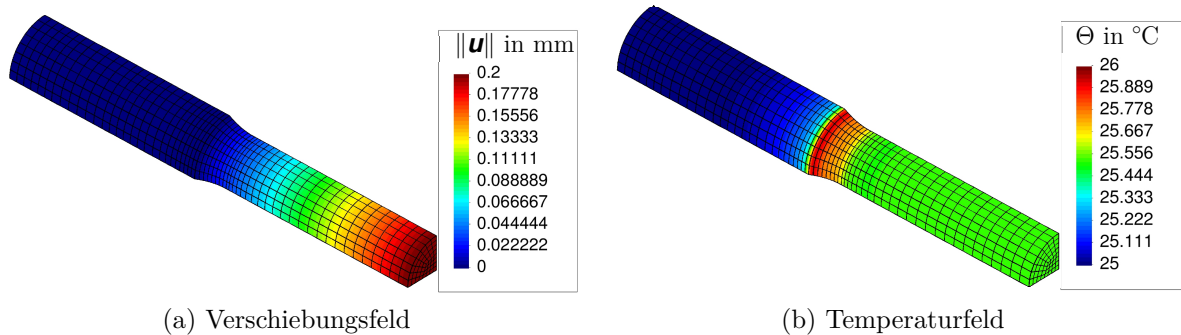


Abbildung 6.35: Darstellung der Verschiebungs- und Temperaturverteilung der Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 10^{-5} \text{ s}$) zum Zeitpunkt $t = 0.075 \text{ s}$

chen die resultierende Deformation und Temperaturverteilung der hochgenauen Referenzlösung zum Zeitpunkt $t = 0.075 \text{ s}$. Die mechanische Einflussnahme auf die Struktur in

³⁵Im Bezug auf das in der vorliegenden Arbeit verwendete Einheitensystem, siehe Abschnitt B.5, muss für den temperaturabhängigen Wärmekapazitätsansatz (6.47) und dessen Parametrisierung, die in SI-Einheiten formuliert sind, eine Konversion des physikalischen Einheitensystems erfolgen. Der Umrechnungsfaktor für die SI-Einheit der Wärmekapazität $\text{J}/(\text{kgK})$ in das gewählte Einheitensystem ist $1 \text{ mm}^2/(\text{s}^2\text{K}) = 10^{-6} \text{ J}/(\text{kgK})$.

Gestalt der Verschiebungsrandbedingung $\bar{u}_y(t)$ ruft infolge plastischer Dissipation Temperaturveränderungen und plastische Deformationen hervor, siehe Abb. 6.36a und 6.36b. Bezugnehmend auf die Konvergenzstudie für das Verschiebungsfeld in Abb. 6.37a ist

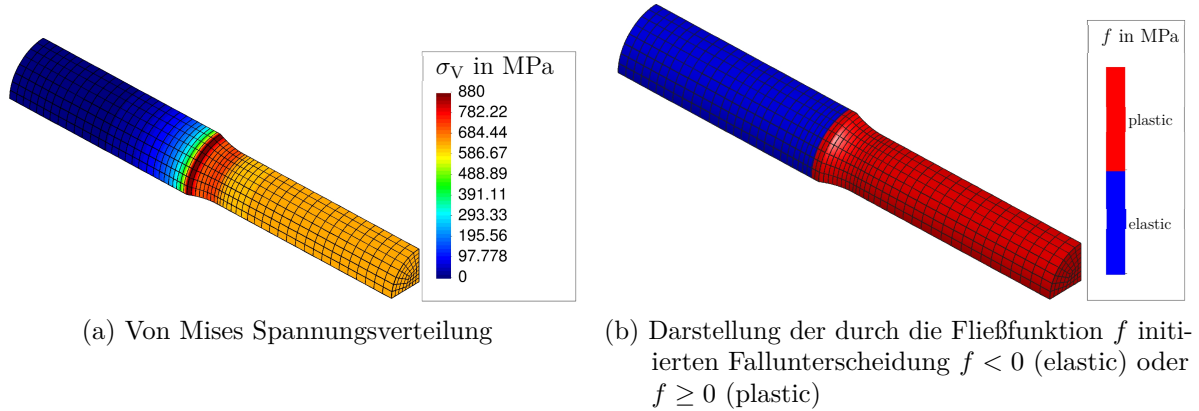
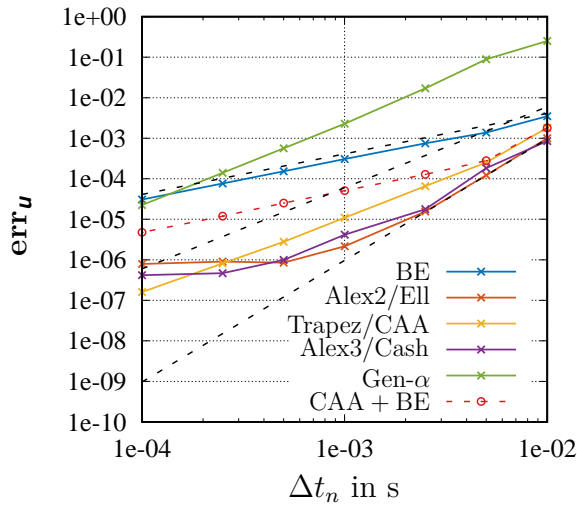


Abbildung 6.36: Darstellung der von Mises Spannungsverteilung und des plastisch-elastischen Fließkriteriums der Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 10^{-5}$ s) zum Zeitpunkt $t = 0.075$ s

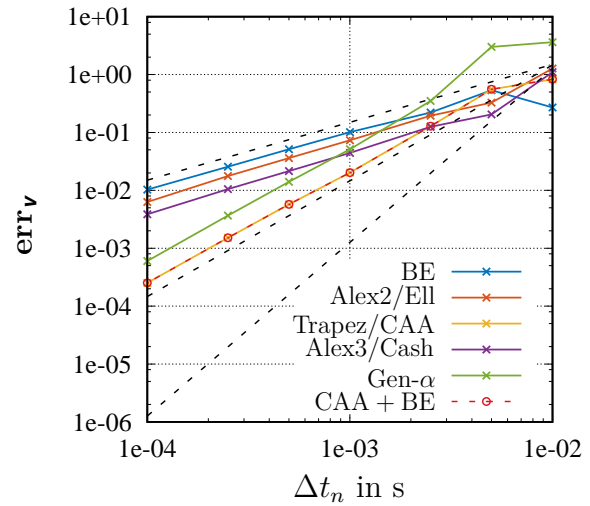
zu erkennen, dass lediglich der einfachste DIRK-Integrator (implizite Euler-Verfahren (BE)), das Newmark-Schemata in der Parametrisierung der Trapezregel (Trapez/CAA) und die Generalized- α Methode (Gen- α) ihre theoretische Konsistenzordnung erreichen. Zudem nimmt im Vergleich zu den bisher durchgeführten Untersuchungen die Fehlerkonstante des zuletzt genannten Verfahrens für das konkretisierte thermomechanisch gekoppelte Beispiel einen deutlich überhöhten Wert an. Die Konvergenzeigenschaften der Verfahren nach Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell) und Alexander/Cash (Alex3/Cash) in Abb. 6.37a degenerieren nach Passieren einer optimalen Schrittweite, was auf die gewählte Genauigkeit des Abbruchkriteriums in der iterativen Lösungsprozedur zurückzuführen ist.

In Ergänzung zu den bisher behandelten Zeitintegrationsverfahren geben die Diagramme 6.37a bis 6.37d Aufschluss über das Konvergenzverhalten eines weiteren Integrationschemas. Der als CAA + BE gekennzeichnete partitionierte Algorithmus verwendet zur Zeitdiskretisierung der räumlich diskretisierten Variationsgleichungen (5.75) und (5.98) die Trapezregel (Trapez/CAA), während auf Gauß-Punktebene zur Behandlung der inneren Variablen ein simpler impliziter Euler-Integrationsschritt Anwendung findet. Infolge der starken Kopplung zwischen der Deformation und den inneren Variablen überträgt sich die künstlich kreierte Ordnungsreduktion in den dissipativen Verzerrungsgrößen, siehe Abb. 6.37d, auf die globale Konvergenzordnung im Verschiebungsfeld, d. h. das CAA + BE-Verfahren erreicht in Abb. 6.37a lediglich $p = 1$. Kommerzielle FEM-Programme, wie beispielsweise FEAP,³⁶ siehe [Taylor, 2013], welche transiente Problemstellungen mittels einer Kombination aus einem Newmark Derivat und dem impliziten Euler-Verfahren zur

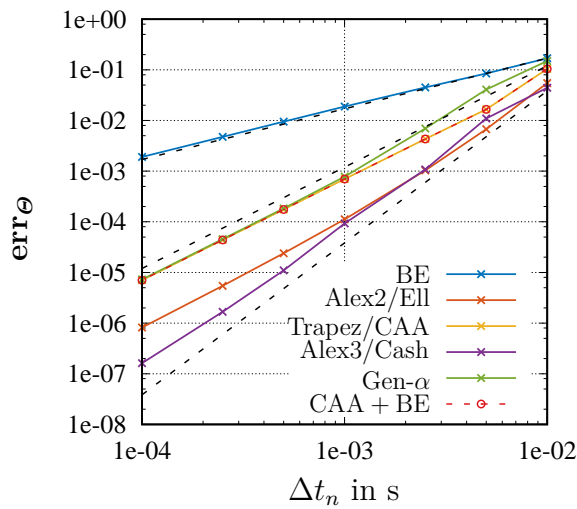
³⁶FEAP ist ein von Prof. R. L. Taylor geschriebenes multifunktionales FEM-Programm zur Berechnung von statischen und dynamischen, linearen und nichtlinearen Problemstellungen.



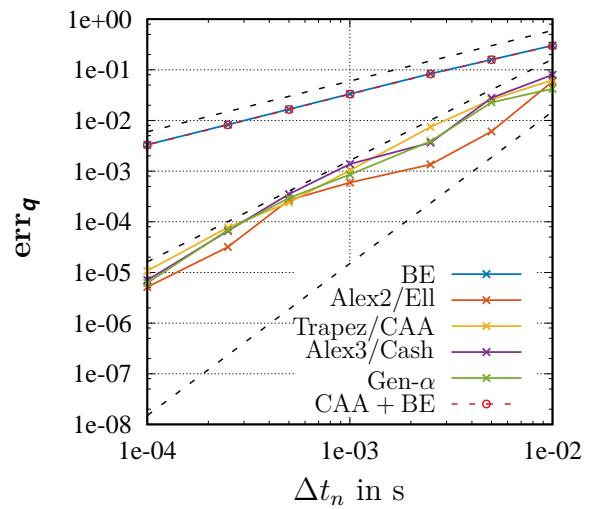
(a) Globaler Fehler der Verschiebungen



(b) Globaler Fehler der Geschwindigkeiten



(c) Globaler Fehler der Temperaturen



(d) Globaler Fehler der inneren Variablen

Abbildung 6.37: Ordnungsdiagramme für Stahlzugprobe, modelliert mit Konstitutivmodell der Thermoviskoplastizität - Globale Zeitintegrationsfehler err_u , err_v , err_θ und err_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

Integration nichtlinearer Konstitutivgleichungen behandeln, können daher eine globale Genauigkeitsordnung von zwei nicht befriedigen.

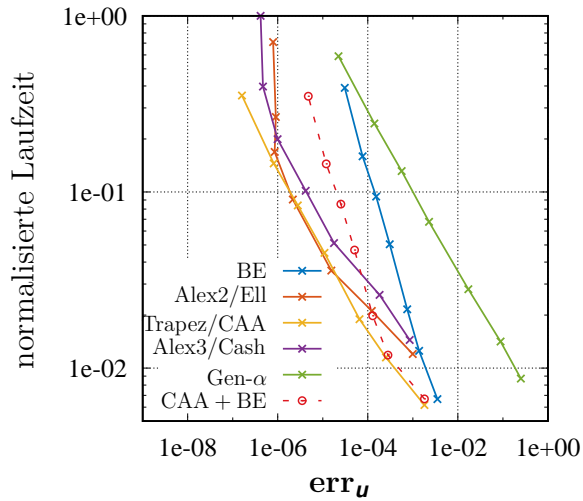
Aus der Analyse des Ordnungsdiagramms 6.37b für die Geschwindigkeiten geht hervor, dass die hochgenauen DIRK-Verfahren Alex2/Ell und Alex3/Cash lediglich eine Konsistenzordnung $p = 1$ erzielen. Die anderen untersuchten Integratoren verhalten sich konform zu den theoretischen Abschätzungen über den globalen Zeitdiskretisierungsfehler, siehe z. B. [Hairer et al., 1993; Strehmel et al., 2012].

Die infolge degenerierender Konsistenzordnungen in den Abb. 6.37a und 6.37b sowie der Präsenz einer starken Kopplung zwischen mechanischen und thermischen Feldvariablen erwartete Übertragung der Konvergenzeigenschaften auf das Temperaturfeld wird durch Abb. 6.37c widerlegt. Das zeitliche Lösungsverhalten der Verfahren deckt sich ohne Widersprüche mit den theoretischen Ergebnissen.

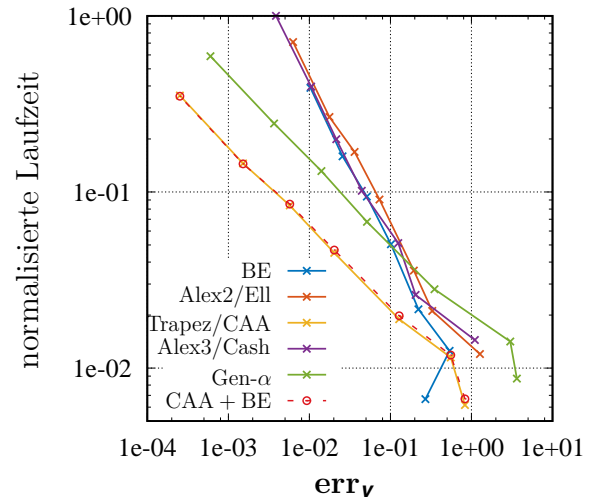
Wie bereits von Ellsiepen [1999], Ellsiepen und Hartmann [2001] und Hartmann und Bier [2008] dargelegt, ist im Konvergenzgraph 6.37d für die inneren Variablen aufgrund fehlender Regularität im Zeitbereich eine Ordnungsreduktion für das Alexander/Cash Verfahren, die zu einer Absenkung der theoretisch realisierbaren dritten Ordnung auf $p = 2$ führt, zu beobachten. Dieses Phänomen ist bereits im Rahmen quasistatischer und isothermer Berechnungen von Ellsiepen und Hartmann [2001] nachgewiesen worden. Darüber hinaus ist für den partitionierten Ansatz CAA + BE in Abb. 6.37d hervorzuheben, dass die bereits für das implizite Euler-Verfahren in Abb. 6.37a prognostizierte Konsistenzordnung $p = 1$ auch auf lokaler Ebene zur Integration des nichtlinearen Spannungsalgorithmus wahrgenommen werden kann.

Neben der Konvergenz ist hinsichtlich einer praktischen Anwendung der numerische Berechnungsaufwand in Bezug zu einer geforderten Präzision ein wesentlicher Punkt zur Bewertung der Verfahren. Die Abbildungen 6.38a bis 6.38d zeigen den Fehler in jeder Feldvariable, aufgetragen über der benötigten Laufzeit des Programms. Zur Normalisierung der Programmlaufzeit wird die größte Ausführungszeit $t_{\text{ref}} = 7301.9 \text{ s}$, ermittelt für eine Simulation mit dem Alex3/Cash-Verfahren und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-4} \text{ s}$, herangezogen. Mit Ausnahme von Abb. 6.38b weisen die diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren zweiter Ordnung (Alex2/Ell, Trapez/CAA) die höchste Effizienz auf. Für eine vorgegebene Fehlerschranke benötigen sie die geringste Durchlaufzeit. Der höhere numerische Aufwand für das Alex3/Cash-Verfahren zahlt sich nicht aus. Das implizite Euler-Verfahren liefert im Rahmen der durchgeführten Aufwands-Genauigkeitsuntersuchungen die schlechtesten Resultate. Sogar für große Berechnungszeiten können nur unzureichende Genauigkeitsanforderungen erfüllt werden. Offensichtlich ist der partitionierte CAA + BE-Ansatz der klassischen Vorgehensweise mittels dem impliziten Euler-Verfahren überlegen. Bezugnehmend auf die Generalized- α Methode lässt diese aufgrund des sehr großen Versatzes auf der Abszisse in Abb. 6.38a nur ein mäßiges Aufwands-Genauigkeitsverhalten erkennen.

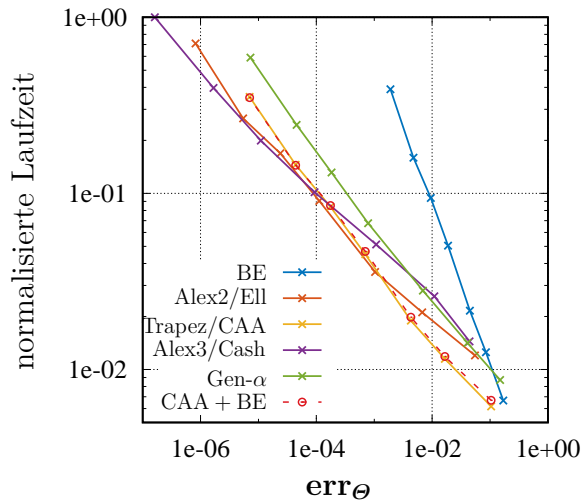
Quasistatische Berechnungen: Um den Einfluss der dynamischen Systemeigenschaften auf die Konvergenzcharakteristik der Verfahren zu analysieren wurden unter Ausschaltung der Massenträgheit, d. h. $\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0}$ und $\overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0}$, konforme quasistatische Berechnungen durchgeführt. Infolge der nicht präsenten Trägheitsterme, wodurch der Einsatz der



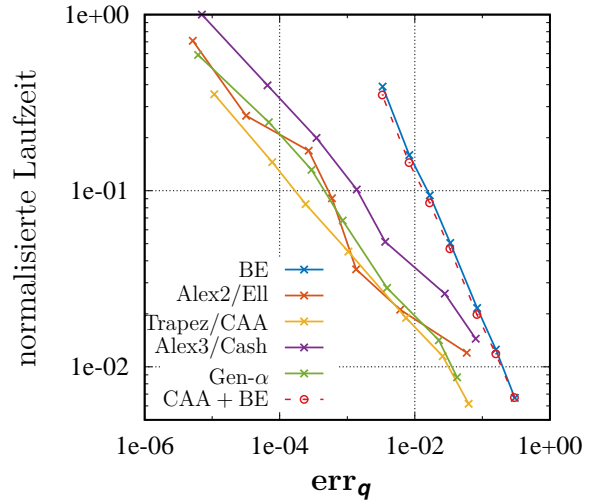
(a) Aufwands-Genauigkeitsdiagramm der Verschiebungen



(b) Aufwands-Genauigkeitsdiagramm der Geschwindigkeiten



(c) Aufwands-Genauigkeitsdiagramm der Temperaturen



(d) Aufwands-Genauigkeitsdiagramm der inneren Variablen

Abbildung 6.38: Aufwands-Genauigkeitsdiagramme für die Stahlzugprobe, modelliert mit Konstitutivmodell der Thermoviskoplastizität - Normalisierte Programmlaufzeit aufgetragen über globalen Zeitintegrationsfehler err_u , err_v , err_θ und err_q

Generalized- α Methode gemäß der in Abschnitt 5.2.4 präsentierten Verfahrensvorschrift ausgeschlossen wird, sind in den Ordnungsdiagrammen 6.39a bis 6.39c lediglich die DIRK-Verfahren und der kombinierte CAA + BE-Algorithmus aufgeführt. Des Weiteren

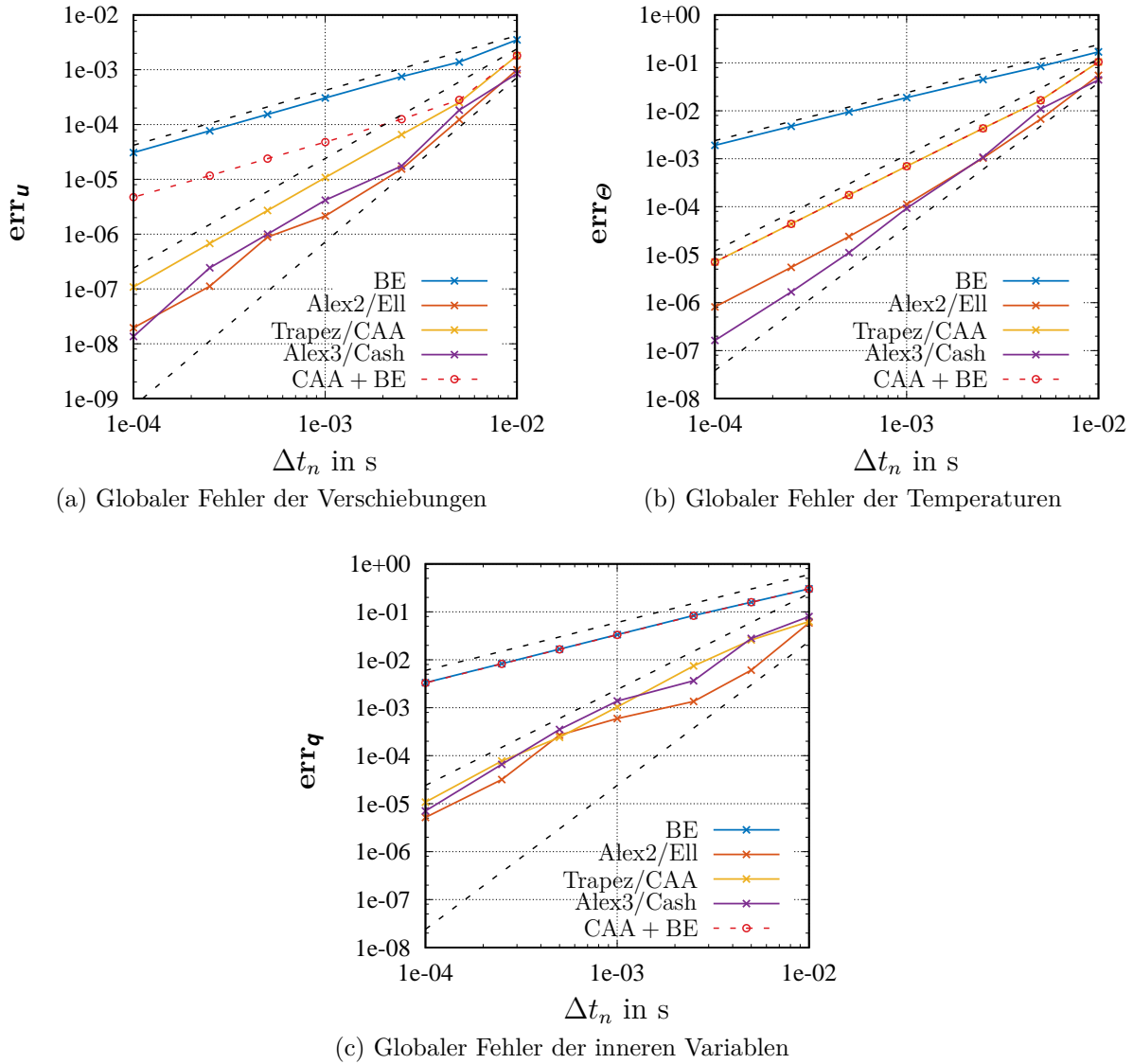


Abbildung 6.39: Ordnungsdiagramme für die Stahlzugprobe, modelliert mit Konstitutivmodell der Thermoviskoplastizität (quasistatische Berechnungen) - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v , \mathbf{err}_θ und \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

wird aufgrund der nicht benötigten globalen Trivialgleichung $\dot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{v}(t)$ und der lediglich inhärent in das Konstitutivmodell eingehenden Geschwindigkeitsabhängigkeit auf eine Untersuchung der Konvergenz des Geschwindigkeitsfeldes verzichtet.

Der Vergleich der Abb. 6.37a, 6.37c und 6.37d mit den Abb. 6.39a bis 6.39c offenbart für die fünf gemeinsamen Integratoren nahezu identische Resultate in den globalen Zeitdiskretisierungsfehlern. Lediglich die Konvergenzeigenschaften für die Verfahren

nach Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell) und Alexander/Cash (Alex3/Cash) in Abb. 6.39a weisen eine Verbesserung auf und lassen eine Zunahme der erreichbaren Genauigkeit erkennen. Infolge einer besseren Konditionierung der aus der konsistenten Linearisierung herrührenden Funktionalmatrix für das quasistatische Problem konnten im Rahmen der iterativen Lösungsprozedur für das globale Newton-Verfahren höhere Genauigkeiten erzielt werden, sodass ein Degenerieren der Konvergenz nicht länger zu beobachten ist. Eine Auswertung der Simulationsergebnisse für die konkret betrachtete Stahlzugprobe ergab weiterhin, dass der Unterschied zwischen der dynamischen und quasistatischen Strukturantwort keine praktische Relevanz hat. Aus diesem Grund bleibt die verbleibende, weiter oben angegebene Argumentation zu den Konvergenzeigenschaften der Verfahren bestehen.

Die Assemblierung der mit dem Zeitschritt gewichteten konstanten Massenmatrix in die globale Funktionalmatrix verursacht keinen hohen numerischen Aufwand und lässt die Konvergenzeigenschaften für das globale Newton-Verfahren nur unwesentlich variieren. Als Folge hiervon bleiben die Rechenzeiten für die quasistatischen Berechnungen nahezu unverändert. Die Abbildungen 6.40a bis 6.40c zeigen die zugehörigen Aufwands-Genauigkeitsdiagramme. Zur Normalisierung der Programmlaufzeit wird die größte Ausführungszeit $t_{\text{ref}} = 7313.0 \text{ s}$ verwendet. Wie zuvor schon angedeutet, unterscheiden sich die Abb. 6.37a, 6.37c und 6.37d im Vergleich zu den Abb. 6.39a bis 6.39c, abgesehen vom Alex2/Ell- und Alexander/Cash-Integrator im Aufwands-Genauigkeitsdiagramm des Verschiebungsfeldes bei höheren Genauigkeiten, nur marginal.

6.2.4 Thermoviskoplastischer Kragträger

Nachdem exemplarisch für das thermomechanisch gekoppelte Feldproblem in den Abschnitten 6.2.1 und 6.2.3 überwiegend die temporalen Konvergenzeigenschaften der analysierten numerischen Verfahren aus Tab. D.1 im Rahmen der in der vorliegenden Arbeit angewendeten monolithischen Lösungsstrategie bestätigt wurden, wird nun mit Hilfe der in Abschnitt 5.2.5 vorgestellten automatischen Schrittweitenkontrolle, dessen korrekte Funktionsweise eine zuverlässige Abschätzung des lokalen Zeitdiskretisierungsfehlers und daher entsprechende Konvergenzcharakteristiken an die eingebetteten Verfahren voraussetzt, das dynamische Verhalten eines in Abb. 6.41a illustrierten thermoviskoplastischen I-Profil-Trägers untersucht. Übereinstimmend mit Abschnitt 6.1.8 skizziert das mit entsprechenden Abmaßen versehene Berechnungsmodell aus Abb. 6.41a einen linksseitig eingespannten Kragarm, dessen Querschnitt einem vereinfachten I-Profil entspricht. Das rechte Ende des Trägers wird durch eine in zwei Lastintervallen unterteilte, zeitabhängige Druckrandbedingung

$$\bar{p}(t) = \begin{cases} K_p t & \text{für } 0 \text{ s} \leq t \leq 1 \text{ s,} \quad \text{mit } K_p = 130 \text{ MPa s}^{-1}, \\ p_0 \sin(2\pi f t) & \text{für } 1 \text{ s} < t \leq 2 \text{ s,} \quad \text{mit } p_0 = 20 \text{ MPa, } f = 233 \text{ Hz,} \end{cases} \quad (6.50)$$

welche auf den vorderen Teil der oberen Flanschfläche wirkt, gemäß Abb. 6.41b belastet. Die Anregungsfrequenz f des harmonischen Belastungsprozesses im zweiten Lastintervall liegt in der Nähe der ersten Eigenfrequenz, siehe auch Abschnitt 6.1.8, sodass der Einfluss der Massenträgheit nicht zu vernachlässigen ist. Der gesamte Träger wird wie schon zuvor

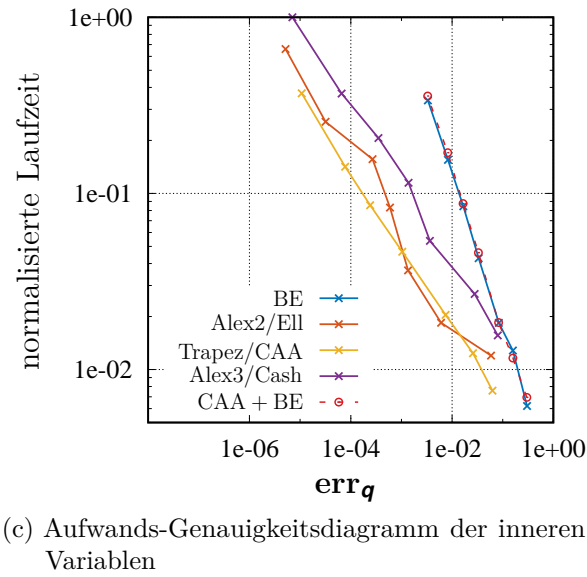
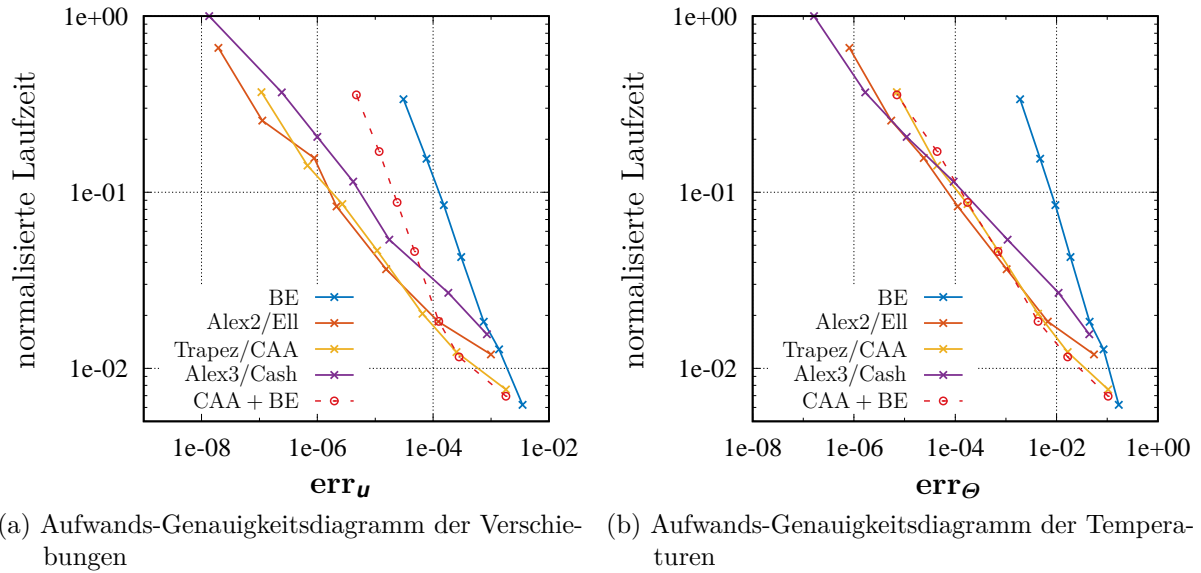


Abbildung 6.40: Aufwands-Genauigkeitsdiagramme für die Stahlzugprobe, modelliert mit Konstitutivmodell der Thermoviskoplastizität (quasistatische Berechnungen) - Normalisierte Programmlaufzeit aufgetragen über globalen Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v , \mathbf{err}_θ und \mathbf{err}_q

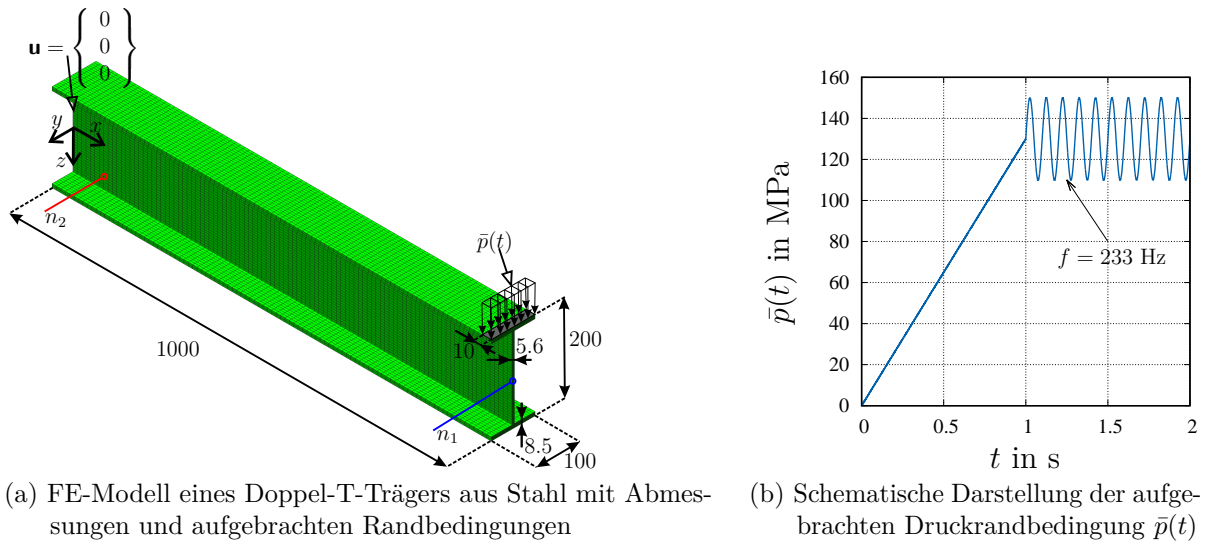


Abbildung 6.41: Thermomechanisch gekoppeltes Berechnungsmodell eines Doppel-T-Trägers und Visualisierung des zugehörigen Belastungsprozesses

in Abschnitt 6.1.8 mit $n^e = 11\,200$ quadratischen Hexaeder-Elementen (Hex20) diskretisiert, sodass $n^n = 68\,591$ Knoten, $n_{uu} = 204\,300$ unbekannte Verschiebungsfreiheitsgrade, $n_{up} = 1473$ fixierte Verschiebungsfreiheitsgrade und $n_{\Theta u} = 68\,591$ zu bestimmende Temperaturfreiheitsgrade resultieren.³⁷ Zur Abbildung der Trägheitseigenschaften der Struktur findet eine konsistente Massenmatrix mit der Dichte $\varrho = 7.836 \times 10^{-9} \text{ t mm}^{-3}$ Anwendung.

Für die Materialmodellierung des stählernen Auslegerbalkens werden im Rahmen der geometrisch linearen Theorie die Stoffgleichungen der Thermoviskoplastizität aus Abschnitt 2.5.3.7 herangezogen, wobei eine identische Parametrisierung des Konstitutivmodells wie in Abschnitt 6.2.3, siehe Tab. 6.6, mit zur Verbesserung der Abbildungsgüte adaptierten, thermischen Materialfunktionen (6.47) und (6.49), zum Einsatz kommt. In Zusammenhang mit dem gewählten Netz und $n_{GP}^e = 27$ Gauß-Punkten pro Element ergibt sich für den global assemblierten Spaltenvektor $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ die Dimension $n_Q = n^e \times n_{GP}^e \times n_q = 3\,628\,800$. Die Definition des Berechnungsmodells vervollständigen die trivialen Anfangsbedingungen $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm}$, $\dot{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}^h, t_0) = \mathbf{0} \text{ mm s}^{-1}$, $\mathbf{q}_0 = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{n_Q}$ sowie die Anfangstemperaturverteilung $\Theta^h(\mathbf{x}^h, t_0)$, mit der konstanten Referenztemperatur $\Theta_0 = 25^\circ \text{C}$.

Sämtliche untersuchte Zeitintegrationsverfahren, zu denen das eingebettete Verfahren nach Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell), das kombinierte Integrationsschema bestehend aus Trapezregel und dem eingebetteten impliziten Euler-Verfahren (Trapez/CAA), siehe Abschnitt D.1, sowie die Generalized- α Methode (Gen- α) zählen, verwenden zur Durchführung der zeitadaptiven Berechnungen mit dem in Abschnitt 5.2.5 vorgestellten hybriden PI-Schrittweitenregler dieselben absoluten und relativen Fehlertoleranzen aus Tab. 6.7. Die übrige Spezifikation des Reglers, siehe Gl. (5.199), ist durch die Kontrollparameter

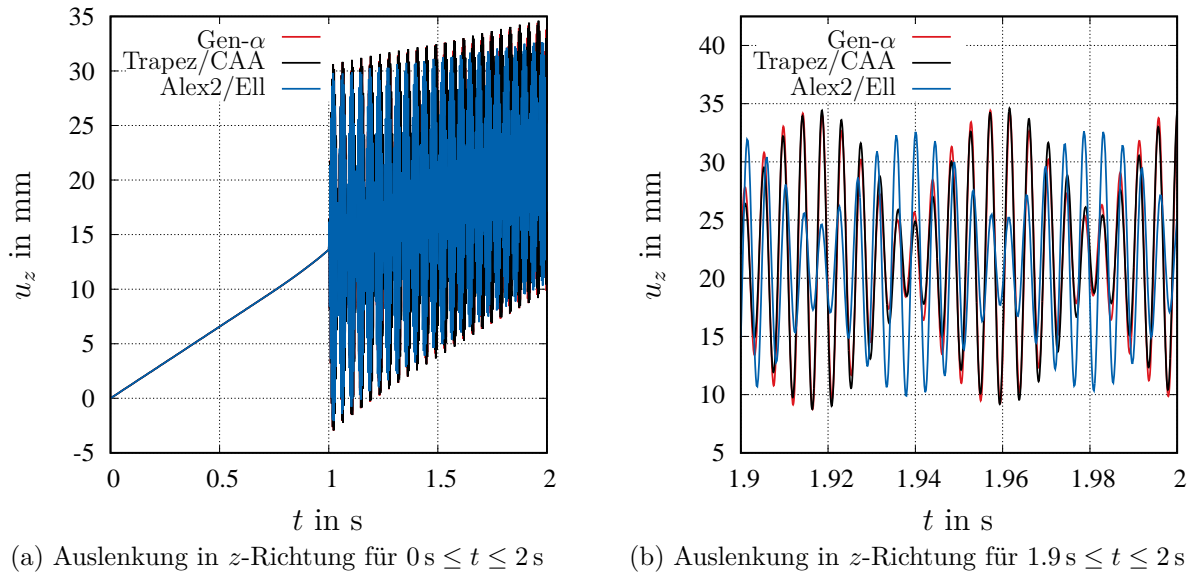
³⁷Der Anteil $\bar{\Theta}(t) \in \mathbb{R}^{n_{\Theta p}}$ für die bekannten Temperaturfreiheitsgrade nimmt die Dimension $n_{\Theta p} = 0$ an, da für das Berechnungsmodell, siehe Abb. 6.41a, keine Temperaturrandbedingungen definiert sind.

Tabelle 6.7: Absolute und relative Fehlertoleranzen der adaptiven Schrittweitenkontrolle

ε_a^u	ε_r^u	ε_a^v	ε_r^v	ε_a^Θ	ε_r^Θ	ε_a^q	ε_r^q
mm	-	mm s ⁻¹	-	°C	-	-	-
10 ⁻²	10 ⁻³	10 ⁻²	10 ⁻³	10 ⁻²	10 ⁻³	10 ⁻⁵	10 ⁻⁵

$f_{\text{safety}} = 0.85$, $f_{\text{min}} = 0.3$, $f_{\text{max}} = 2.5$ sowie die Verstärkungsfaktoren $\tilde{K}_I = 1/(\hat{p} + 1)$ und $\tilde{K}_P = 1/(\hat{p} + 1)$, die von der Konsistenzordnung des eingebetteten Verfahrens \hat{p} abhängen, definiert. Am Beginn jedes Lastintervall, d. h. für $t_n = t_0 = 0$ s und $t_n = t_H = 1$ s, wird der Zeitintegrationsprozess mit einer Anfangsschrittweite $\Delta t_0 = 10^{-2}$ s bzw. $\Delta t_H = \Delta t_0$ gestartet.

Um die Algorithmen gegenüberstellen zu können, wird die Strukturantwort an den Knoten n_1 und n_2 , welche sich an den Positionen $\mathbf{X}_{n_1} = \{10^3, 0, 0\}^T$ mm und $\mathbf{X}_{n_2} = \{40, 0, 71.17\}^T$ mm befinden, ausgewertet. Während Abb. 6.42 die Auslenkung in z -

Abbildung 6.42: Auswertung der Verschiebungsantwort in z -Richtung im Knoten n_1

Richtung am Knoten n_1 zeigt, visualisiert Abb. 6.43 die Temperaturentwicklung am zweiten Auswertungspunkt n_2 . Die zugehörige Schrittweitenentwicklung, die für den obigen Belastungsprozess durch die adaptive Schrittweitenkontrolle ermittelt wird, stellt Abb. 6.44 dar. In den Vergrößerungen 6.42b und 6.43b, die das Zeitintervall $1.9 \text{ s} \leq t \leq 2 \text{ s}$ innerhalb des harmonisch angeregten Lastintervall herausgreifen, ist deutlich zu erkennen, dass die angewendete Generalized- α Methode und das Newmark-Verfahren in der Parametrisierung der Trapezregel hinsichtlich Amplituden- als auch Phasenverhalten nahezu übereinstimmende Resultate erzielen. Abgesehen von der ersten eher statisch geprägten monoton ansteigenden Phase der Belastung $0 \text{ s} \leq t \leq 1 \text{ s}$, in der die numerische Lösung

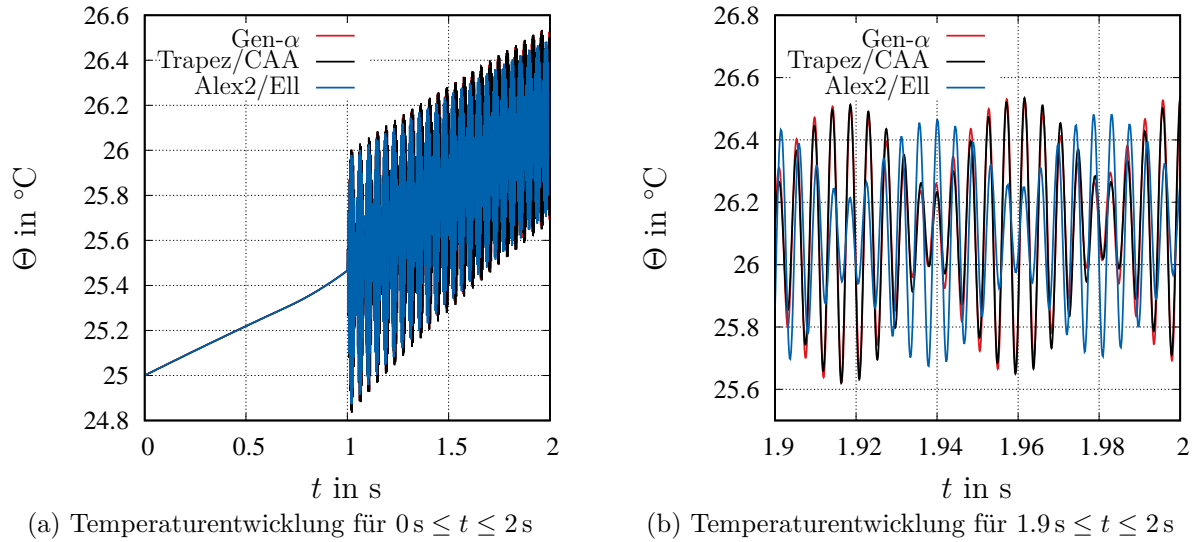


Abbildung 6.43: Auswertung der Temperaturentwicklung im Knoten n_2

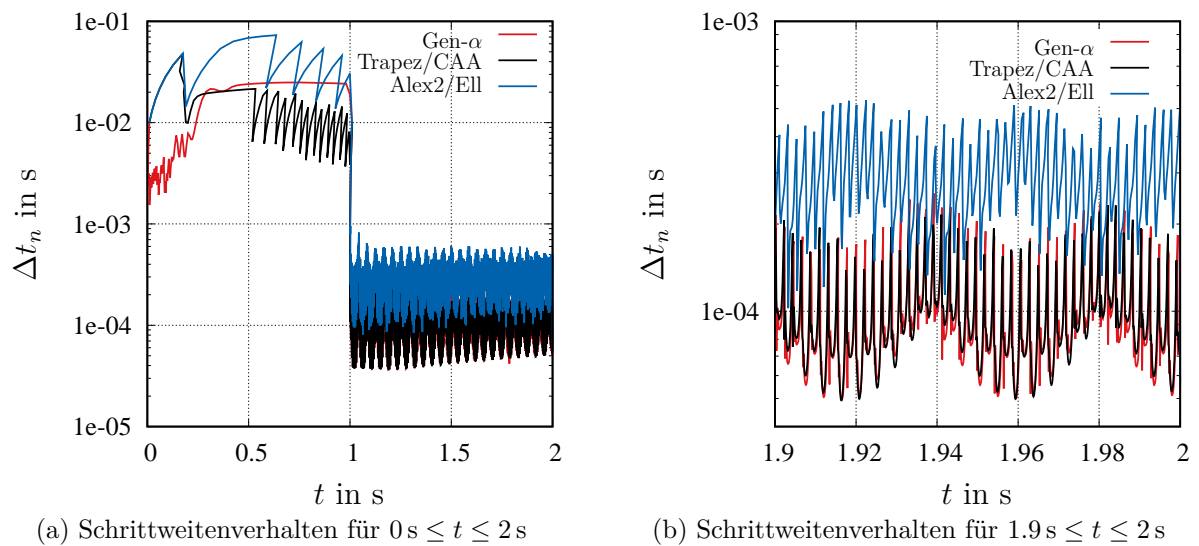


Abbildung 6.44: Schrittweitenverhalten der adaptiven Schrittweitensteuerung

mit relativ großen Zeitschritten voranschreitet, weisen zudem die beiden Algorithmen in Abb. 6.44 für $t_n \geq 1$ s ähnliche Schrittweitensequenzen auf. Zur Einhaltung der vorgegebenen Fehlertoleranzen muss das Zeitinkrement Δt_n in dem oszillierenden Lastintervall aufgrund der Anregung höherfrequenter Strukturmoden signifikant abgesenkt werden. Die Verwerfungen von Δt_n im statisch dominierenden Lastbereich sind auf die Limitierung der Stabilität des angewendeten Mehrebenen-Newton-Verfahrens zurückzuführen. Bei einem zu groß abgeschätzten Zeitschritt divergiert das Newton-Verfahren auf lokaler Ebene. Trotz der Ähnlichkeiten in den Berechnungsergebnissen und dem Schrittweitenverhalten unterscheiden sich die Generalized- α Methode und die Trapezregel dramatisch in den Rechenzeiten, siehe Tab. 6.8. Mit Blick auf die Abschnitte 5.2.6 und 5.2.7 wird die

Tabelle 6.8: Berechnungsaufwand der angewendeten Integrationsschemata zur Durchführung der zeitadaptiven Berechnungen

Methoden	Anzahl Zeitschritte	Rechenzeit	Effizienzfaktor
Gen- α	12 592	253 136 s	0.54
Trapez/CAA	12 601	467 034 s	1
Alex2/Ell	4107	106 077 s	0.23

annähernde Halbierung des Rechenaufwands für die Generalized- α Methode gegenüber der Trapezregel nachvollziehbar. Während die eingebettete Version der Trapezregel zur Approximation des lokalen Fehlers auf eine zusätzliche in das Butcher-Tableau integrierte implizite Euler Stufe zurückgreift, siehe Abschnitt D.1, konstruiert der lokale Fehlerschätzer der effizienteren Generalized- α Methode aus Abschnitt 5.2.7 die Approximationen des lokalen Fehlers aus bereits vorliegenden Lösungskomponenten. Der damit eingesparte zusätzliche Berechnungsschritt für den Gen- α -Integrator erklärt den resultierenden Effizienzfaktor von 54 %. Das eingebettete Verfahren nach Alexander/Ellsiepen benötigt die wenigsten Zeitschritte, wodurch sich im Vergleich zu den anderen Integratoren auch die Rechenzeit minimiert. Infolge der im zweiten Lastintervall durchlaufenen größeren Zeitschritte für den Alex2/Ell-Integrator treten zunehmende Dispersions- und algorithmische Dämpfungseffekte in den Vordergrund, die bezogen auf die vorherigen Zeitdiskretisierungsverfahren zu den in den Abb. 6.42 und 6.43 dargestellten Phasenversätzen und Amplitudenreduktionen führen.

Die exemplarisch mit dem Alex2/Ell-Integrator berechnete Strukturantwort für das Verschiebungs- und Temperaturfeld sowie die von Mises Spannungsverteilung zum Zeitpunkt $t = 2$ s zeigen die Abbildungen 6.45a bis 6.45c. Aufgrund der Präsenz eines thermoelastischen Kopplungsterms im Konstitutivmodell, siehe Abschnitt 2.5.3.2, tritt die höchste Temperatur im unteren Teil des Kragarms in der Nähe der Einspannung auf. Zudem ist in Abb. 6.45d für $t = 2$ s das Unterscheidungskriterium zwischen dem elastischen und plastischen Bereich in Gestalt der von Mises-Fließfunktion f veranschaulicht. Nach der Initialisierung der harmonischen Belastung entwickelt sich ausgehend von der unteren und oberen Flanschfläche in der Umgebung der Einspannung eine plastische Zone.

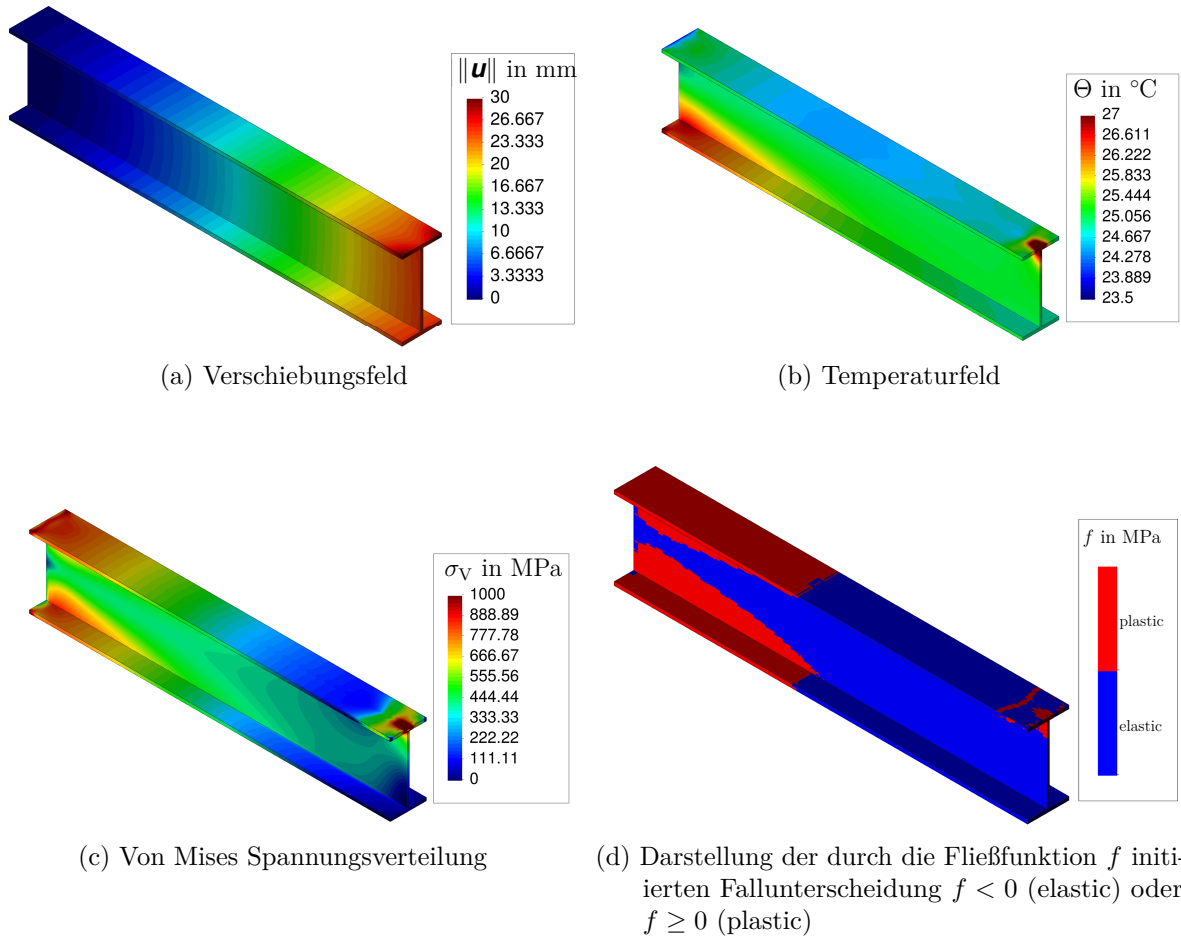


Abbildung 6.45: Darstellung der Verschiebungs-, Temperatur-, und von Mises Spannungsverteilung sowie des plastisch-elastischen Fließkriteriums am Ende der zeitadaptiven Simulation für $t = 2$ s, generiert mit dem Alex2/Ell-Integrator

Zur Demonstration des Einflusses der Massenträgheit auf die Temperaturverteilung wurde eine weitere quasistatische, zeitadaptive Berechnung, welche auf die Terme $\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0}$ und $\bar{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0}$ verzichtet, für das in Abb. 6.41a repräsentierte Berechnungsmodell durchgeführt. Die Differenz zwischen den Temperaturverteilungen einer dynamischen und quasistatischen Simulation zum Zeitpunkt $t = 2\text{ s}$ ist in Abb. 6.46 dargestellt. Es ist

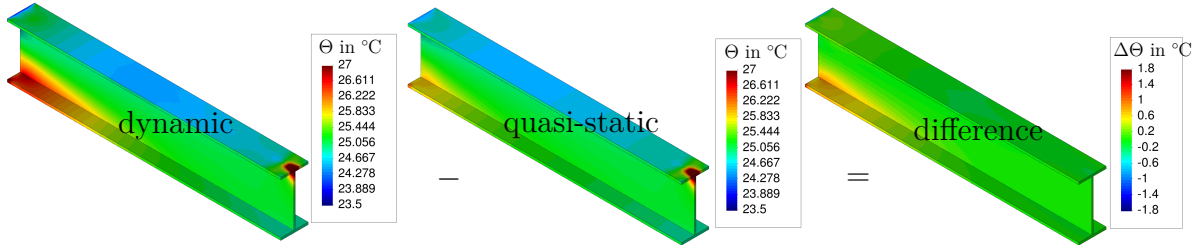


Abbildung 6.46: Darstellung der Temperaturdifferenz zwischen dynamischer und quasistatischer Berechnung zum Zeitpunkt $t = 2\text{ s}$, generiert mit dem Alex2/Ell-Integrator

zu erkennen, dass der Unterschied in den beiden inhomogenen Temperaturverteilungen, welche unmittelbar aus dem physikalischen Dissipationsmechanismus des Materialmodells herrühren, am größten im unteren Bereich der Einspannung ausfällt. Wie das linke Teilbild von Abb. 6.46 für die dynamische Struktursimulation zeigt, verstärken Trägheitseffekte die Dissipation.

6.3 Interfaceberechnungen

In den nachfolgenden Ausführungen soll die Leistungsfähigkeit der in den Abschnitten 5.5 bis 5.9 vorgestellten mortar-basierten Finite-Elemente-Methode anhand einiger exemplarischer Kontaktbeispiele demonstriert werden. Wie zuvor liegt auch hier der Fokus auf der Analyse des temporalen Fehlerverhaltens für die behandelten Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung sowie der Anwendung von adaptiven Strategien zur Steuerung der Zeitschrittweite.

6.3.1 Viskoelastische Stäbe

Das nachfolgende eindimensionale Beispiel soll zunächst die prinzipielle Eignung von Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung bei der Behandlung von Kontakt demonstrieren. Abb. 6.47 illustriert das zu analysierende geometrisch lineare Berechnungsmodell, dessen

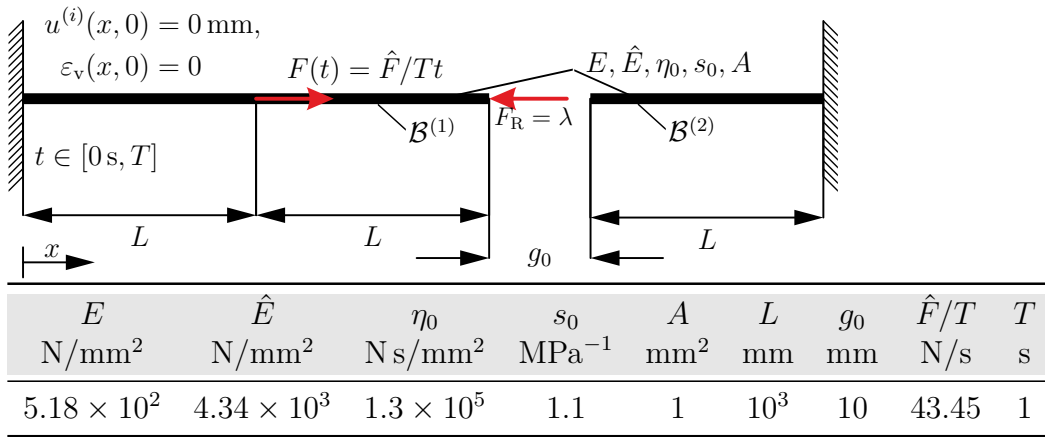


Abbildung 6.47: Kinematisch lineares Berechnungsmodell zur Simulation der Kontaktinteraktion zwischen zwei nichtlinear-viskoelastischen Stäben

Problemformulierung vollständig durch den Gleichungssatz

$$\frac{\partial N^{(i)}(x, t)}{\partial x} = 0, \quad N^{(i)} = \sigma^{(i)} A, \quad \sigma^{(i)} = E \varepsilon^{(i)} + \hat{E}(\varepsilon^{(i)} - \varepsilon_v^{(i)}), \quad \varepsilon^{(i)} = \frac{\partial u^{(i)}}{\partial x}, \quad (6.51)$$

$$\dot{\varepsilon}_v^{(i)} = \frac{\hat{E}}{\eta^{(i)}}(\varepsilon^{(i)} - \varepsilon_v^{(i)}), \quad \eta^{(i)} = \eta_0 e^{-s_0 |\sigma^{(i)} - E \varepsilon^{(i)}|}, \quad i = 1, 2,$$

$$u^{(i)}(x, 0) = 0, \quad \varepsilon_v^{(i)}(x, 0) = 0, \quad (6.52)$$

$$u^{(1)}(0, t) = 0, \quad u^{(2)}(3L + g_0, t) = 0, \quad (6.53)$$

$$N^{(1)}(2L, t) = -\lambda(t), \quad N^{(2)}(2L + g_0, t) = -\lambda(t), \quad (6.54)$$

$$g(t) := u^{(2)}(2L + g_0, t) - u^{(1)}(2L, t) + g_0, \quad g \geq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad \lambda g = 0 \quad (6.55)$$

gegeben ist. Hierin repräsentieren die einem Stabkontinuum $\mathcal{B}^{(i)}$, $i = 1, 2$ zugeordneten Feldfunktionen $u^{(i)}(x, t)$, $N^{(i)}(x, t)$, $\sigma^{(i)}(x, t)$ und $\varepsilon^{(i)}(x, t)$ das primäre Verschiebungsfeld

$u^{(i)}(x, t)$, $i = 1, 2$, die Normal- bzw. Schnittkraft in einem materiellen Punkt der Stäbe $N^{(i)}(x, t)$, $i = 1, 2$, die Beanspruchung der linienförmigen Strukturen in Gestalt der Normalspannung $\sigma^{(i)}(x, t)$, $i = 1, 2$, und das kinematisch lineare Verzerrungsfeld $\varepsilon^{(i)}(x, t)$, $i = 1, 2$. Das Materialverhalten der beiden geometrisch linearen Stabkontinua wird durch das in Abschnitt 2.5.3.5 spezifizierte eindimensionale nichtlineare Viskoelastizitätsmodell, mit den konstanten Materialkennwerten E , \hat{E} , η_0 , s_0 , siehe Abb. 6.47, abgebildet. Weiterhin sei die Querschnittsfläche der Stäbe durch die Konstante A gegeben. Darüber hinaus kommt zur Behandlung der in Abb. 6.47 illustrierten Kontaktproblematik die Lagrange-Multiplikator-Methode zum Einsatz. Aufgrund des punktuellen Charakters des Kontakt-Interface muss lediglich ein einziger skalarwertiger Lagrange-Multiplikator λ , welcher als Reaktionskraft interpretierbar ist, zur Erzwingung der Kopplungsbedingungen aufgewendet werden.

Zum Initialisierungszeitpunkt sind der linksseitig fixierte Stab $\mathcal{B}^{(1)}$ und der rechtsseitig fest eingespannte Körper $\mathcal{B}^{(2)}$ durch den Abstand g_0 voneinander getrennt. Dies ändert sich, sobald die monoton anwachsende Einzelkraft $F(t) = \hat{F}/Tt$ in der Mitte des linken Stabes eingeleitet wird und sich die Distanz $g(t)$, siehe Gl. (6.55)₁, zwischen $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$ verringert. Übersteigt die Kraft $F(t)$ ein kritisches Plateau, kommt es zur Berührung der beiden Strukturen in der punktuellen Kontaktschnittstelle und die Lücke ist geschlossen, d. h. $g(t) = 0$. Als Folge der Erzwingung dieser geometrischen Gleichheitsnebenbedingung wird in der durch Abb. 6.47 angezeigten Richtung die Reaktionskraft $F_R(t) = \lambda(t) > 0$ übertragen. Ist das kritische Einzelkraftniveau noch nicht erreicht, folgt unmittelbar aus dem alternativen Lösungszweig der KKT-Bedingungen (6.55)₂ bis (6.55)₄ $F_R(t) = \lambda(t) = 0$ und $g(t) > 0$.

Die Gewährleistung der eindimensionalen Gleichgewichtsbedingung (6.51)₁ mündet wegen der kongruenten Forderung $\partial\sigma^{(i)}(x, t)/\partial x = 0$, $i = 1, 2$, in einem homogenen, also ortsunabhängigen Spannungszustand. Dieser bildet sich allerdings aufgrund des Vorhandenseins diverser Krafteinleitungsstellen bei $x = L$ und im Kontakt-Interface nur bereichsweise aus. Weiterhin impliziert das räumlich unabhängige Spannungsfeld $\sigma^{(i)}(x, t)$, $i = 1, 2$, in den einzelnen Teilbereichen $0 \leq x \leq L$, $L < x \leq 2L$ und $(2L + g_0) \leq x \leq (3L + g_0)$ in Kombination mit einem homogenen und isotropen Materialverhalten einen homogenen Verzerrungszustand. Dies führt zu der logischen Schlussfolgerung, dass zur Gebietszerlegung des Berechnungsmodells aus Abb. 6.47 drei lineare Linienelemente (Lin2) ausreichend sind, wobei der linke Stab in zwei Elemente und das rechtsseitig angeordnete Stabkontinuum in ein Element aufgeteilt wird. Im Zusammenhang mit der in Abb. 6.48 dargestellten Vernetzung ist der Raumdiskretisierungsfehler damit nicht mehr präsent.

Zur Veranschaulichung des durch die Material- und Kontaktnichtlinearität verursachten Strukturverhaltens zeigt Abb. 6.49a die zeitliche Entwicklung der von Null verschiedenen diskreten Verschiebungsfreiheitsgrade $u_1(t)$, $u_2(t)$ und $u_3(t)$, siehe Abb. 6.48, die das in Bezug auf die Raumkoordinate x stückweise stetige Verschiebungsfeld

$$\begin{aligned} u^{(1)}(x, t) &= \begin{cases} \frac{x}{L}u_1(t) & \text{für } 0 \leq x \leq L, \\ (2 - \frac{x}{L})u_1(t) + (\frac{x}{L} - 1)u_2(t) & \text{für } L < x \leq 2L, \end{cases} \\ u^{(2)}(x, t) &= (3 + \frac{g_0}{L} - \frac{x}{L})u_3(t) \quad \text{für } (2L + g_0) \leq x \leq (3L + g_0) \end{aligned} \quad (6.56)$$

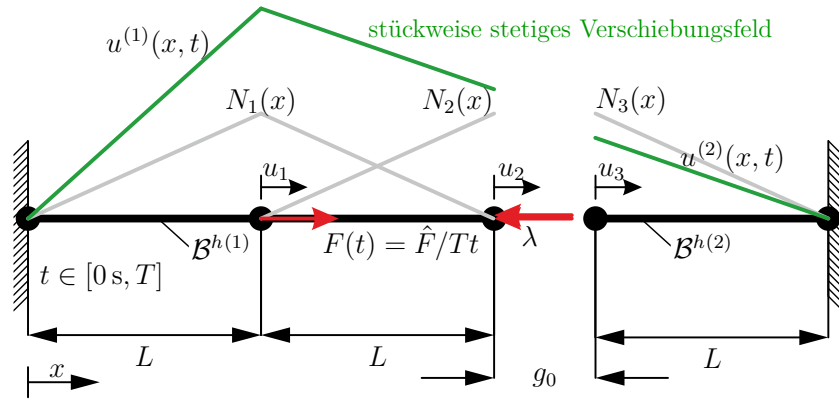
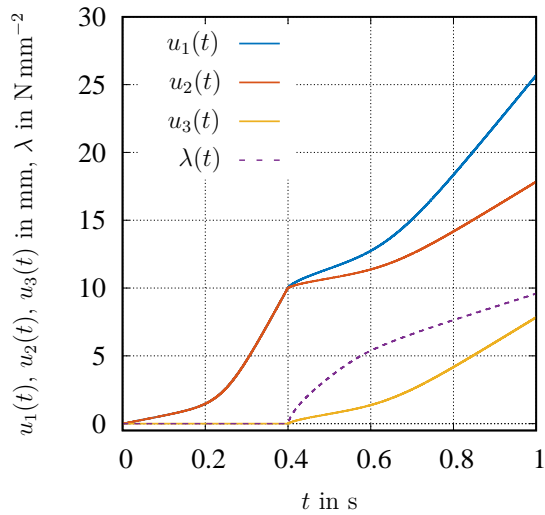
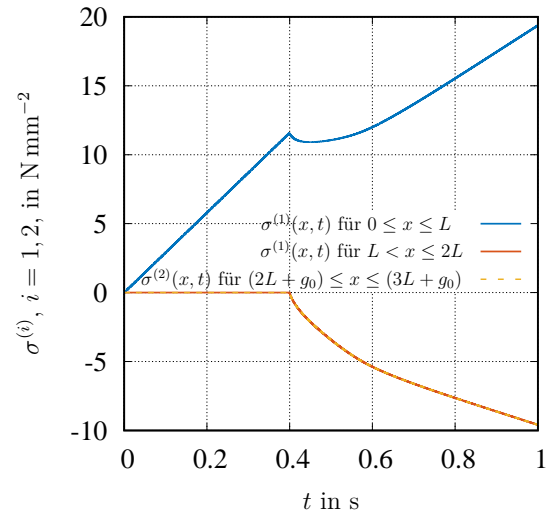


Abbildung 6.48: FE-Modell der Stabkontinua, bestehend aus drei linearen Linienelementen zur exakten räumlichen Wiedergabe des sich stückweise stetig ausbildenden Verschiebungsfeldes $u^{(i)}(x, t)$, $i = 1, 2$



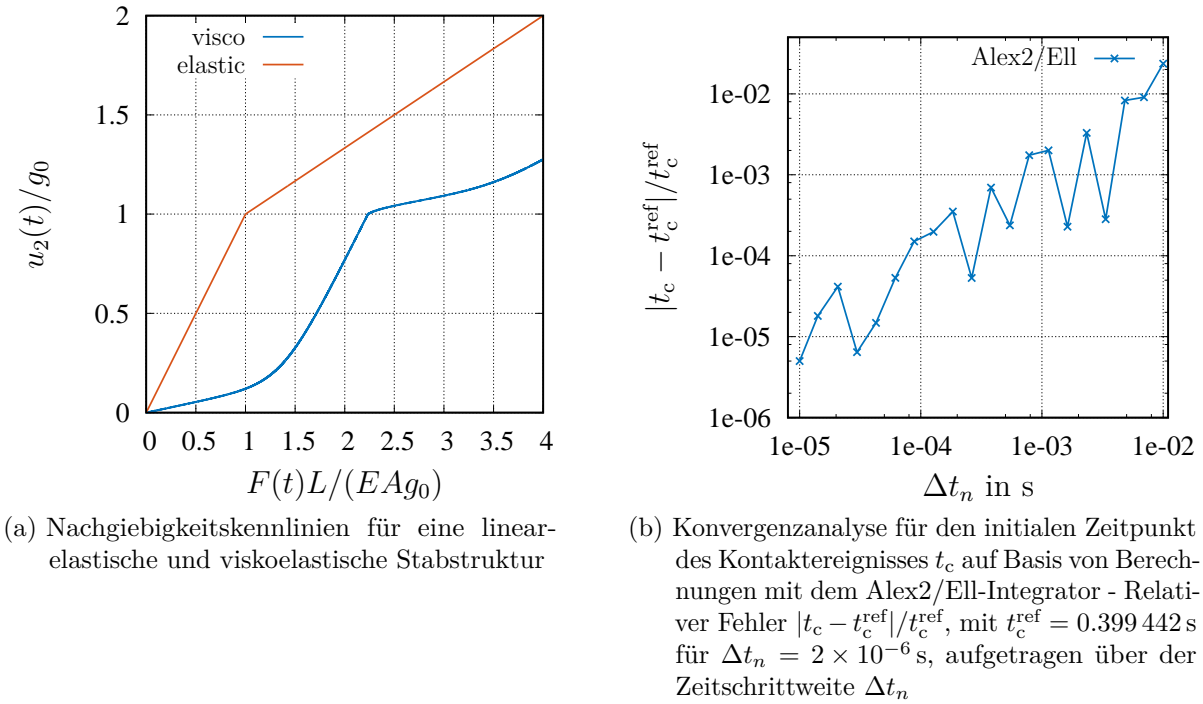
(a) Verlauf der Verschiebungsfreiheitsgrade $u_1(t)$, $u_2(t)$, $u_3(t)$ und des Lagrange-Multiplikators $\lambda(t)$



(b) Verlauf der in den einzelnen Elementen orts-unabhängigen Spannungszustände

Abbildung 6.49: Darstellung des nichtlinearen Strukturverhaltens für das in Abb. 6.47 illustrierte Berechnungsmodell

formen. Die temporale Evolution des Lagrange-Multiplikators $\lambda(t)$, siehe Abb. 6.49a, sowie der konstanten Spannungszustände in den Stabelementen, siehe Abb. 6.49b, ergänzen das Antwortverhalten des physikalisch nichtlinearen Kontaktsystems. Der Einfluss des geschwindigkeitsabhängigen Materialmodells wird deutlich, wenn die viskoelastische Strukturreaktion einer linear-elastischen Antwort, die nur den Elastizitätsmodul E aus der Abb. 6.47 beigelegten Tabelle berücksichtigt, gegenübergestellt wird. Abb. 6.50a zeigt



(a) Nachgiebigkeitskennlinien für eine linear-elastische und viskoelastische Stabstruktur

(b) Konvergenzanalyse für den initialen Zeitpunkt des Kontakt ereignisses t_c auf Basis von Berechnungen mit dem Alex2/Ell-Integrator - Relativer Fehler $|t_c - t_c^{\text{ref}}|/t_c^{\text{ref}}$, mit $t_c^{\text{ref}} = 0.399442$ s für $\Delta t_n = 2 \times 10^{-6}$ s, aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

Abbildung 6.50: Gegenüberstellung des nichtlinear-viskoelastischen Strukturverhaltens des in Abb. 6.47 illustrierten Berechnungsmodells mit der Strukturreaktion eines linear-elastischen Berechnungsmodells; Veranschaulichung des Fehlerverhaltens für t_c (Eintritt des Kontakt ereignisses)

hierzu invers aufgetragene Federkennlinien (Nachgiebigkeitskennlinien) der Stabstruktur. Als Folge der in dem Materialmodell von Abschnitt 2.5.3.5 verankerten Superposition aus Gleichgewichts- und Überspannungen verläuft die Federkennlinie des viskoelastischen Stabsystems (visco) stets rechts von der linear-elastischen Last-Verschiebungskurve (elastic). Erstere Kennlinie verhält sich also nicht so nachgiebig bzw. steifer wie Letztere. Auch insbesondere der Steifigkeitszuwachs des Stabwerks bei aktivem Kontakt ist für beide Simulationen in Abb. 6.50a deutlich identifizierbar. Wie Wriggers [2006, S. 18–21] detailliert darlegt, wird das linear-elastische Antwortverhalten des FE-Modells aus Abb. 6.48 durch die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\begin{bmatrix} 2\frac{EA}{L} & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ -\frac{EA}{L} & \frac{EA}{L} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{EA}{L} & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \\ \lambda(t) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F(t) \\ 0 \\ 0 \\ -g(t) \end{Bmatrix} \quad (6.57)$$

bei Kontakt, wobei dieser Fall für $F(t) > EA g_0/L$ eintritt, und bei nicht aktiver Koppelungsbedingung, also $g(t) > 0$, durch die lineare Abbildungsvorschrift

$$\frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F(t) \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad \text{für } F(t) \leq EA g_0/L \quad (6.58)$$

vollständig beschrieben.

Die durch die Materialfunktion (6.22)₄ induzierte nichtlineare Ratenabhängigkeit des betrachteten viskoelastischen Konstitutivmodells boykottiert das Auffinden einer geschlossenen analytischen Lösung, sodass die in den Abb. 6.49 und 6.50 gezeigten Ergebnisse das Resultat einer Simulation mit dem Alex3/Cash-Verfahren und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 5 \times 10^{-5}$ s sind. Darüber hinaus werden auf Basis dieser hochgenauen Berechnung, welche zugleich als numerische Referenzlösung zur Bestimmung der Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q , siehe Gl. (6.1)₁ und (6.2)₂, Anwendung findet, temporale Konvergenzordnungsuntersuchungen für die in Tab. D.1 angegebenen DIRK-Verfahren,³⁸ mit den konstanten Zeitschrittweiten

$$\Delta t_n = \{10^{-2} \text{ s}, 5 \times 10^{-3} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-3} \text{ s}, 10^{-3} \text{ s}, 5 \times 10^{-4} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-4} \text{ s}, 10^{-4} \text{ s}\},$$

durchgeführt. Die Abbildungen 6.51a und 6.51b geben die Resultate der angekündigten

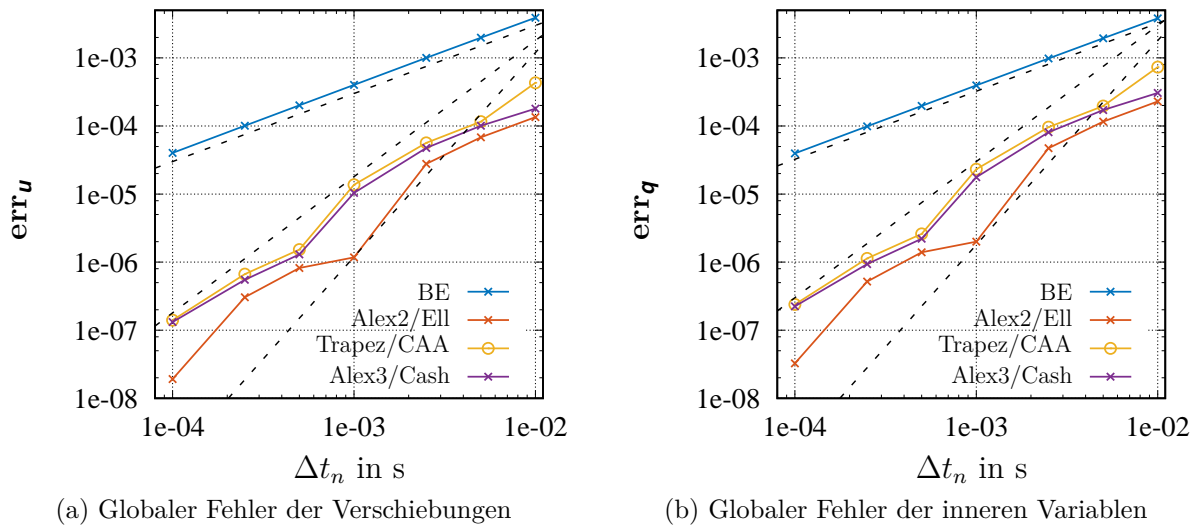


Abbildung 6.51: Ordnungsdiagramme für das Kontaktproblem zwischen zwei nichtlinear-viskoelastischen Stäben - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

Ordnungsanalysen wieder. Es zeigt sich deutlich, dass im Rahmen des behandelten Kontaktproblems die Konsistenzordnungen der Trapezregel (Trapez/CAA) und des Verfahrens nach Alexander/Cash (Alex3/Cash) hinter den theoretischen Erwartungen zurück

³⁸Die Untersuchung des Konvergenzverhaltens der Generalized- α Methode ist nicht möglich, da es sich um eine quasistatische Systemanalyse handelt.

bleiben. So ergeben sich exemplarisch für das Verschiebungsfeld lediglich die gemittelten Konsistenzordnungen $p_{\text{Trapez}/\text{CAA}} \approx 1.7435$, und $p_{\text{Alex3}/\text{Cash}} \approx 1.5679$. Insbesondere der Alex3/Cash-Integrator weicht damit erheblich von der theoretisch realisierbaren Konvergenzordnung $p = 3$ ab. Das Zeitdiskretisierungsverfahren zweiter Ordnung nach Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell) befriedigt dagegen die an den Integrator gesetzten Erwartungen und konvergiert in den Abb. 6.51a und 6.51b mit einer durchschnittlichen Neigung von $p_{\text{Alex2}/\text{Ell}} \approx 1.92$. Zur Ursachenforschung der nicht mit der Theorie konformen Resultate sei der relative Fehler in den Verschiebungen und den inneren Variablen grafisch über der Zeit in den Abb. 6.52 und 6.53 veranschaulicht. Mit Blick auf Abb. 6.52a

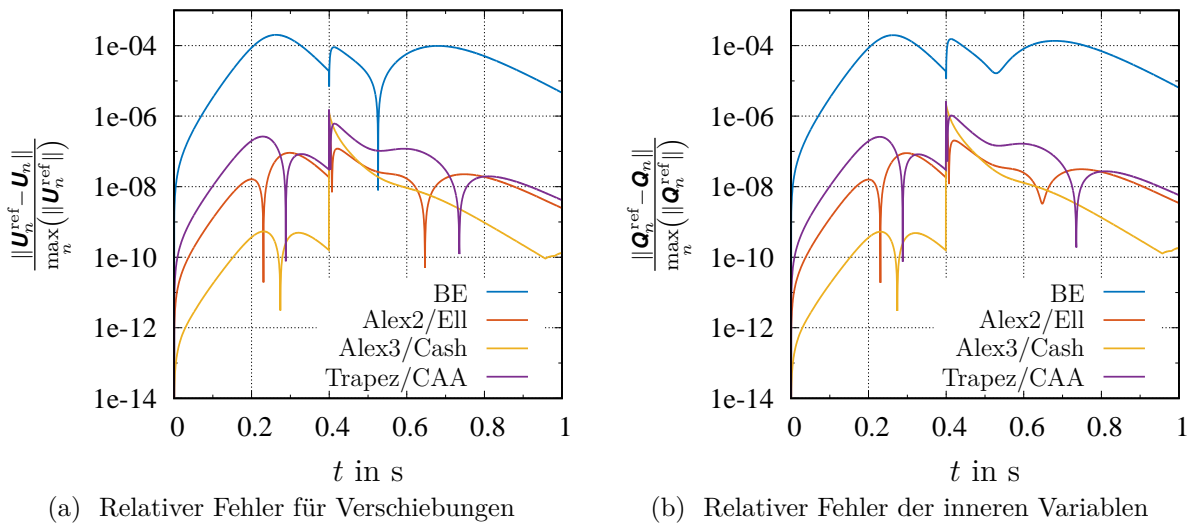


Abbildung 6.52: Zeitlicher Verlauf der relativen Fehler in den Verschiebungen und den inneren Variablen, berechnet auf Basis verschiedener Methoden mit einer konstanten Zeitschrittweite $\Delta t_n = 10^{-4}$ s

und 6.52b, in denen die DIRK-Verfahren für $\Delta t_n = 10^{-4}$ s direkt einander gegenübergestellt sind, wird deutlich, dass die hochgenauen Integratoren (Trapez/CAA, Alex2/Ell und Alex3/Cash) den maximalen Fehlerausschlag beim Herstellen des Initialkontakts aufweisen. Die Abb. 6.53a und 6.53b bestätigen die Aussage für das Alex2/Ell-Verfahren bei verschiedenen Zeitschrittweiten. Das in der vorliegenden Arbeit angewendete Auswertungskonzept für die temporalen Konvergenzstudien, siehe Abschnitt 6.1, bezieht das gesamte betrachtete Zeitintervall $[t_0, t_e]$ zwischen $t_0 = 0$ s und $t_e = T = 1$ s ein. Infolgedessen werden die in den Abb. 6.52a und 6.52b angezeigten Fehlerdiskontinuitäten in den Ordnungsdigrammen 6.51a und 6.51b zum Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-4}$ s abgebildet. Damit verschuldet die Singularität des Zeitdiskretisierungsfehlers zum Zeitpunkt des einzigen Kontakt ereignisses $t_c \approx 0.4$ s allem Anschein nach die beschriebene Degeneration der Konsistenzordnungen. Wie u. a. Abb. 6.50b am Beispiel des Alex2/Ell-Integrators belegt, ist die exakte Bestimmung von t_c nicht realisierbar. Die oben erwähnte Fehlersingularität wird damit lediglich in der zeitlichen Nähe des Initialkontakts ausgewertet. Aus Sicht des Autors der vorliegenden Monographie stellt dies eine erhebliche Einschränkung an die Regularität im Zeitbereich dar. Vergleichbar zu Problemstellungen aus dem Bereich der

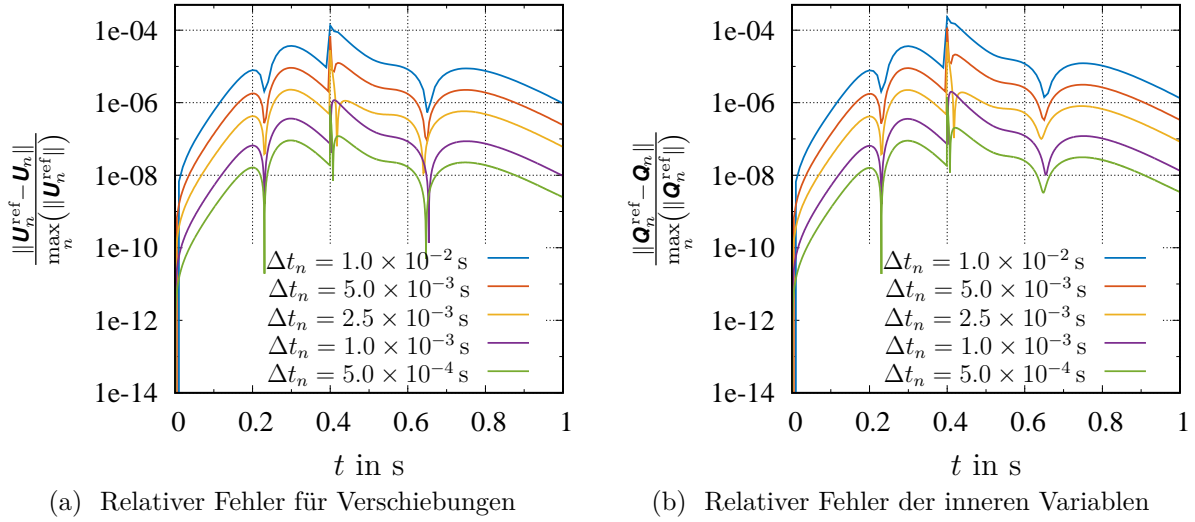


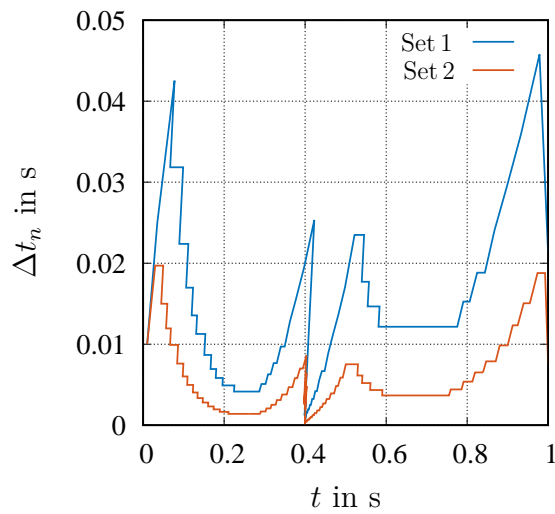
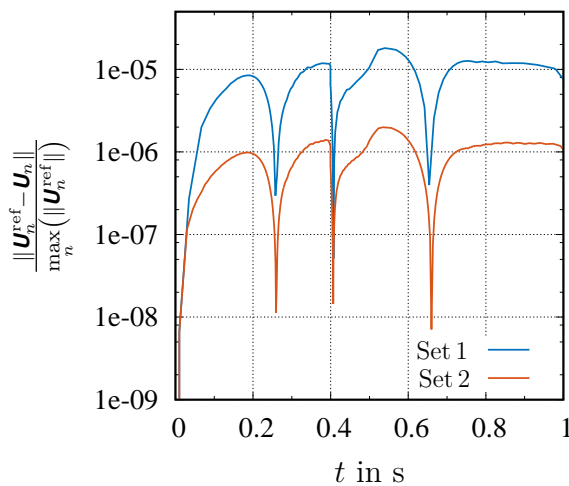
Abbildung 6.53: Zeitlicher Verlauf der relativen Fehler in den Verschiebungen und den inneren Variablen, berechnet auf Basis des Alex2/Ell-Integrators und verschiedenen Herabstufungen der konstanten Zeitschrittweite Δt_n

Plastizität, siehe [Ellsiepen und Hartmann, 2001; Hartmann und Bier, 2008], wird auf Basis dieser einfachen numerischen Beobachtungen die Aussage getroffen, dass temporale Konvergenzordnungen im Zeitbereich für nicht glatte Kontaktprobleme durch eine obere Schranke $p \leq 2$ limitiert sind.

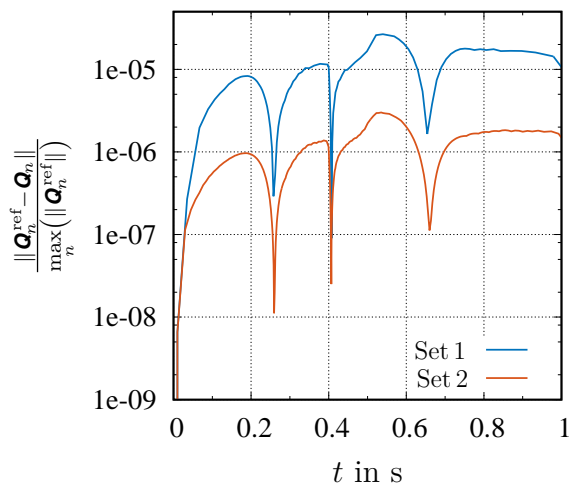
Eine der Grundvoraussetzungen bei der Applikation der in Abschnitt 5.2.5 vorgestellten Strategien zur automatischen Schrittweitenkontrolle stellt das asymptotische Konvergenzverhalten der behandelten Zeitintegrationsverfahren dar. Diese wurde mit den vorangegangenen Untersuchungen für das eindimensionale Kontaktproblem aus Abb. 6.47 bestätigt. Folglich soll nun die praktische Umsetzung einer Zeitadaptivitätsstrategie in Bezug auf die analysierte Problemstellung geprüft werden. Entsprechend dem Konzept der adaptiven Schrittweitensteuerung wird mit Hilfe eines eingebetteten Verfahrens der lokale Integrationsfehler des aktuellen Zeitschritts geschätzt, um mit dieser Information gemäß der Selektionsregel (5.196) des Standardreglers die Länge des nächsten Zeitschritts zu dimensionieren. Für die nachfolgenden Untersuchungen kommt als eingebettetes RK-Schema der bereits zuvor favorisierte Alex2/Ell-Integrator zum Einsatz. Den verwendeten Kontrollparametersatz, einschließlich der zwei herangezogenen Sätze von absoluten und relativen Fehlertoleranzen, für eine adaptive Schrittweitensteuerung mit dem Standardregler, siehe Abschnitt 5.2.5, listet Tab. 6.9 auf. Die mit der vorliegenden Parametrisierung des Reglers generierten Schrittweitensequenzen stellt Abb. 6.54a grafisch dar. Wie zu erwarten ist, führt der präzisere Fehlertoleranzsatz (Set 2) im Vergleich zu der durch die erste Zeile von Tab 6.9 definierten Reglerkonfiguration (Set 1) zu einer Absenkung der Schrittweiten Δt_n . Es ist offensichtlich, dass im Bereich des Kontaktereignisses bei $t_c \approx 0.4$ s zur Beschränkung des lokalen Integrationsfehlers der Zeitschritt Δt_n signifikant reduziert wird. Nach mehrmaligen aufeinander folgenden Schrittweitenverwerfungen stabilisiert sich jedoch die Integrationsprozedur wieder. Weiterhin bestätigen die Abb. 6.54b

Tabelle 6.9: Parametrisierung des verwendeten Standardreglers zur automatischen Schrittweitensteuerung, vgl. Abschnitt 5.2.5

Set	ε_a^u mm	ε_r^u —	ε_a^q —	ε_r^q —	f_{safety} —	f_{max} —	f_{min} —	\hat{f}_{min} —	\hat{f}_{max} —
Set 1	10^{-4}	10^{-4}	10^{-6}	10^{-6}	0.85	2.5	0.3	1.0	1.2
Set 2	10^{-5}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-7}	0.85	2.5	0.3	1.0	1.2

(a) Schrittweitenverhalten für zeitadaptive Berechnungen mit dem Alex2/Ell-Integrator - Zeitschritt Δt_n aufgetragen über der Zeit t 

(b) Relativer Fehler für Verschiebungen



(c) Relativer Fehler der inneren Variablen

Abbildung 6.54: Schrittweiten- und Fehlerverhalten der adaptiven Schrittweitensteuerung

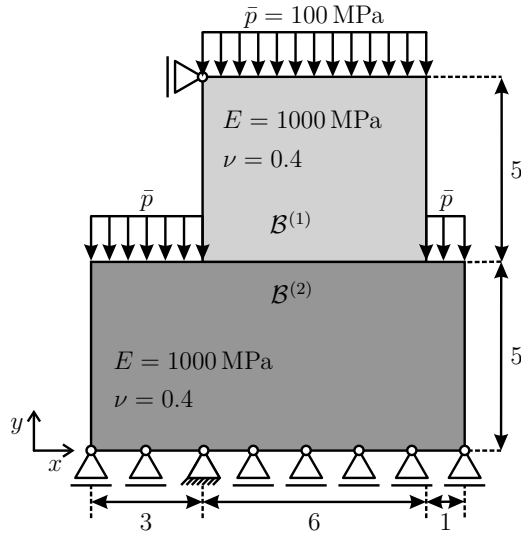
und 6.54c, dass die Kontrolle des lokalen Integrationsfehlers eine Beschränkung des globalen Zeitdiskretisierungsfehlers herbeiführt oder zumindest ein starkes Anwachsen des globalen Zeitdiskretisierungsfehlers verhindert.

6.3.2 Zweidimensionaler Kontakt-Patch-Test

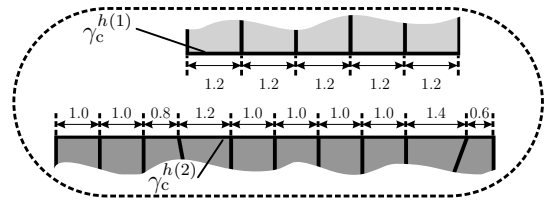
Der Kontakt-Patch-Test, welcher ursprünglich in [Taylor und Papadopoulos, 1991] als numerisches Minimalbeispiel zur Bewertung der Spannungsübertragung zwischen kontaktierenden Körpern eingeführt wurde, dient dazu, eine räumliche Kontaktdiskretisierung auf ihre Konsistenz zu überprüfen. Dabei begutachtet dieser konservative Verifikations-test, ob die Kontaktformulierung in der Lage ist, ein räumlich konstantes Spannungsfeld entlang nicht-konform diskretisierter Kontaktoberflächen exakt von einer Interface-Seite auf die gegenüberliegende Oberfläche der Schnittstelle zu übertragen.

Zur Definition einer konkreten Problemstellung werden Geometrie, Vernetzung, Belastung und Fesselungsbedingungen von der in [Hartmann, 2007] vorgestellten zweidimensionalen Problembeschreibung übernommen, siehe auch [McDevitt und Laursen, 2000; Yang et al., 2005; Cichosz, 2012]. Das in Bezug auf das FE-Netz im Vergleich zur Originalarbeit von Yang et al. [2005] leicht abgeänderte numerische Testbeispiel zeigt Abb 6.55. Gemäß Abb. 6.55a wird der obere linear-elastische Block (obere Stempel $\mathcal{B}^{(1)}$) auf das darunter liegende linear-elastische Fundament (untere Block $\mathcal{B}^{(2)}$) gepresst. Für beide Körper werden dieselben elastischen Materialeigenschaften $E = 10^3 \text{ N mm}^{-2}$ und $\nu = 0.4$, siehe Abschnitt 2.5.3.4, angenommen. Zur Herstellung des reibungsfreien Normalkontakts zwischen den Körpern wirkt eine gleichmäßig verteilte Druckbeanspruchung von $\bar{p} = 100 \text{ MPa}$ auf die Oberseite von $\mathcal{B}^{(1)}$. Um das Berechnungsmodell allgemein zu halten, sitzt der obere Stempel, mit der kleineren Interface-Seite, leicht exzentrisch versetzt auf $\mathcal{B}^{(2)}$. Weiterhin ist zur Übertragung eines homogenen Spannungszustands in das Fundament hinein auch der nicht bedeckte Teil der Master-Seite mit der Flächenpressung $\bar{p} = 100 \text{ MPa}$ zu beaufschlagen. Letztere wird im Rahmen einer statischen Systemanalyse in einem einzigen Lastschritt appliziert.

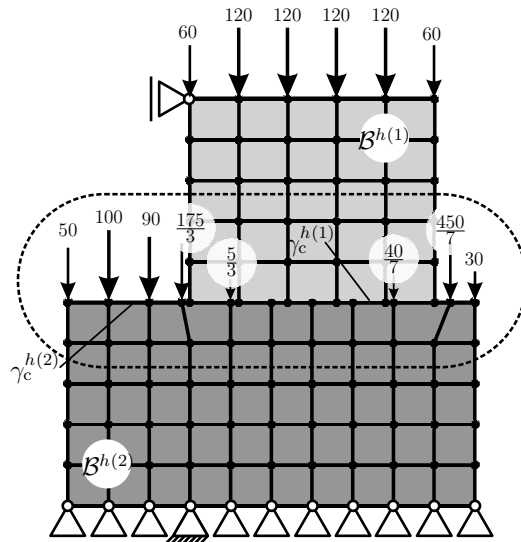
Den Ausführungen in [Yang et al., 2005; Hartmann, 2007] folgend wird zu Vernetzung der kontaktierenden Körper, konform zum Materialmodell, eine Elementformulierung für kleine Deformationen herangezogen. Für die auf den freien Oberflächen von $\mathcal{B}^{h(1)}$ und $\mathcal{B}^{h(2)}$ aufgebrachte Druckbeanspruchung $\bar{p} = 100 \text{ MPa}$ erfolgt eine Umrechnung in äquivalente Knotenkräfte, siehe Abb. 6.55c und 6.55d. Damit wird nicht die in Abb. 6.55a visualisierte Flächenpressung sondern das Ensemble von diskreten Einzellasten auf den entsprechenden Randbereichen appliziert. Zur Behandlung der Kontaktinteraktion findet jedoch weiterhin die in der vorliegenden Arbeit präsentierte mortar-basierte Kontaktformulierung für große Deformationen in Verbindung mit einer Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation Anwendung. Obwohl sich streng genommen die einzelnen aufgezählten Komponenten der Modellierung dieses in der einschlägigen Literatur anerkannten Testbeispiels nicht vollständig konsistent zueinander verhalten, wird zur Verifikation der hier vorgestellten mortar-basierten Kontaktdiskretisierungstechnik im \mathbb{R}^2 diese leichte Diskrepanz absichtlich in Kauf genommen. Weiterhin sei darauf hingewiesen, dass die gewählten Fesselungsrandbedingungen sowie die einheitliche Materialpaarung essenziellen Anteil an der Übertragung eines räumlich konstanten Spannungsfeldes entlang der



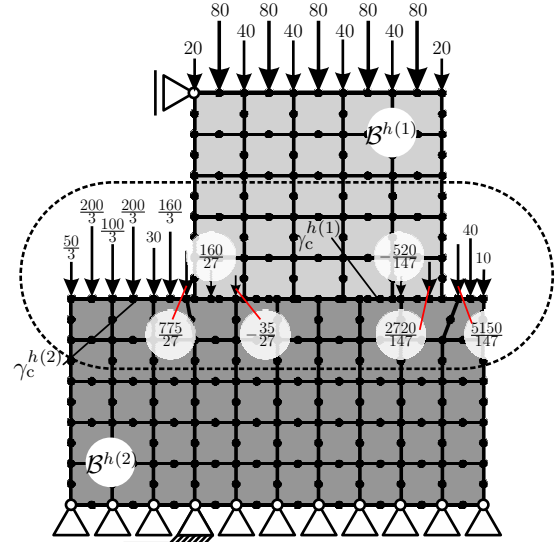
(a) Problemdefinition: Geometrie, Belastung, Verschiebungsrandbedingungen und Materialdaten



(b) Ausschnitt des nicht-konform diskretisierten Kontakt-Interface mit zugehörigen Abmessungen der Oberflächendiskretisierungen



(c) Raumdiskretisierung mit bilinearen Elementen und Spezifikation der in äquivalente Knotenkräfte umgerechneten Neumann-Randbedingungen, ausgedrückt in der Dimension Kraft pro Einheitsdicke (N mm^{-1})



(d) Raumdiskretisierung mit biquadratischen Elementen und Spezifikation der in äquivalente Knotenkräfte umgerechneten Neumann-Randbedingungen, ausgedrückt in der Dimension Kraft pro Einheitsdicke (N mm^{-1})

Abbildung 6.55: Zweidimensionaler Kontakt-Patch-Test: Problemdefinition und Diskretisierung

nicht-konform vernetzten Kontaktoberflächen haben. Damit reduziert sich die gesamte Problemstellung der Informationsübermittlung auf den Nachweis für die Erfüllung des diskreten Kräftegleichgewichts im geometrisch nichtlinearen Kontakt-Interface.

Unter der Annahme eines ebenen Spannungszustandes erfolgt die Berechnung des Interfaceproblems aus Abb. 6.55a einerseits mit bilinearen Elementen, siehe Abb. 6.55c, oder auf Grundlage einer Raumdiskretisierung mit biquadratischen Ansatzfunktionen, siehe Abb. 6.55d. Die Resultate des zweidimensionalen Kontakt-Patch-Tests in Gestalt des sich einstellenden Verschiebungsfeldes und dem absoluten Fehler $|\sigma_{yy} - \sigma_{yy}^{\text{ref}}|$ in der vertikalen Komponente der Cauchyschen Spannung σ_{yy} sind den Abb 6.56 und 6.57 zu

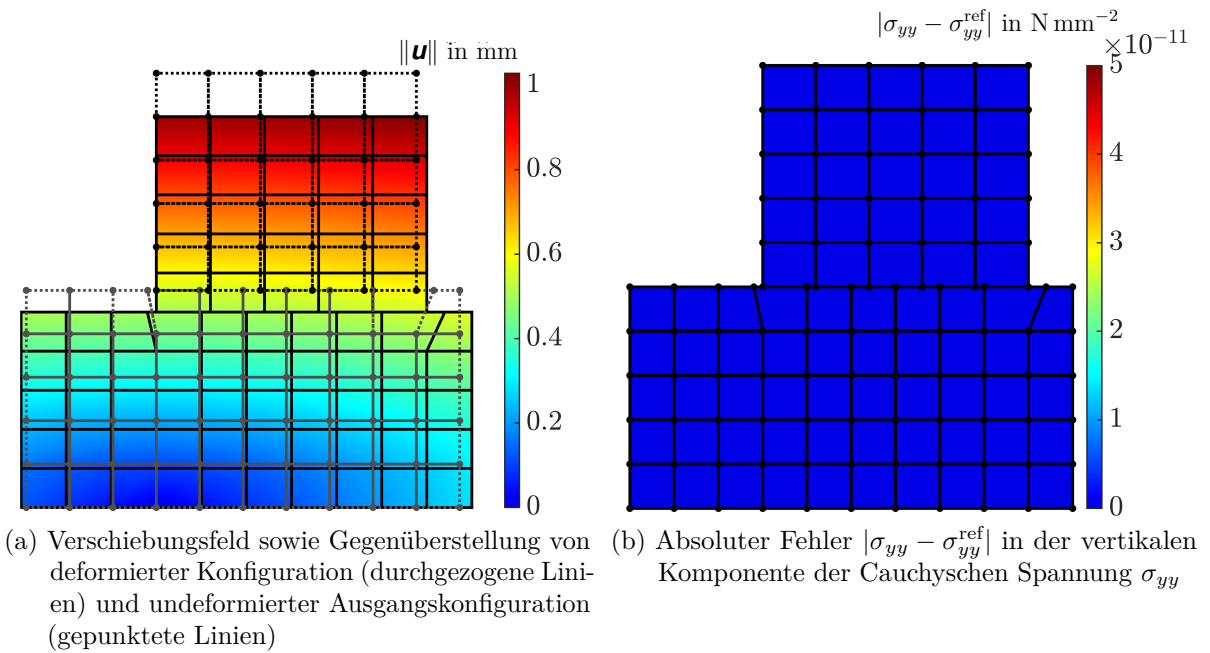


Abbildung 6.56: Veranschaulichung der Resultate des zweidimensionalen Kontakt-Patch-Tests für eine Berechnung mit bilinearen Elementen

entnehmen. Obwohl nicht im Detail durch einen farbigen Konturgraph veranschaulicht, lässt sich aus der Gegenüberstellung von deformierter Konfiguration (durchgezogene Linien) und unverformter Ausgangslage (gepunktete Linien), siehe Abb. 6.56a und 6.57a, ableiten, dass sich in x - und y -Richtung ein lineares Verschiebungsfeld ausbildet. Hieraus resultiert ein konstanter Spannungszustand in beiden Körpern, dessen Abweichungen exemplarisch für die Normalspannungen in vertikaler Richtung σ_{yy} vom analytisch exakten Wert $\sigma_{yy}^{\text{ref}} = -100 \text{ MPa}$ in den Abb. 6.56b und 6.57b dargestellt sind. Somit besteht die vorgestellte mortar-basierte Kontaktformulierung im Rahmen der Maschinengenauigkeit den zweidimensionalen Kontakt-Patch-Test. Außerdem sei explizit darauf hingewiesen, dass die Erfüllung des Kontakt-Patch-Tests durch die Wahl von Slave- und Master-Seite nicht beeinflusst wird. Falls die in Abb. 6.55c bzw. Abb. 6.55d zugewiesenen Rollen vertauscht werden, ist lediglich darauf zu achten, dass der in Abschnitt 5.5.4.2 erörterte segmentbasierte Konstruktionsansatz für die dualen Ansatzfunktionen zur Anwendung kommt.

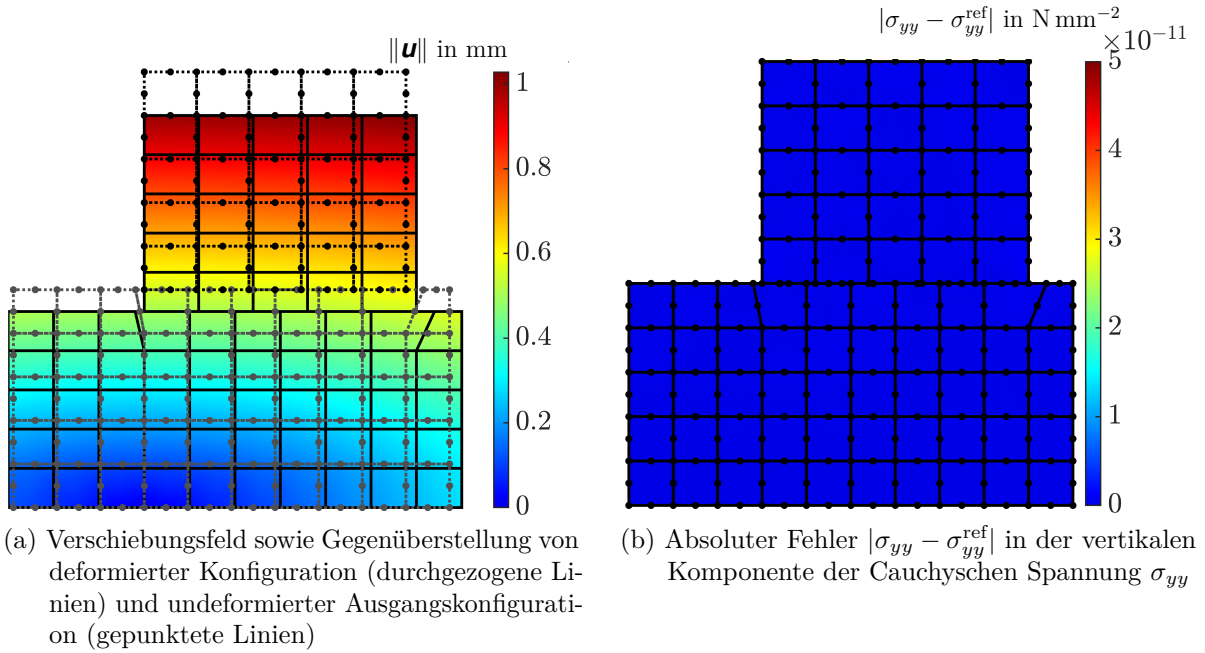


Abbildung 6.57: Veranschaulichung der Resultate des zweidimensionalen Kontakt-Patch-Tests für eine Berechnung mit biquadratischen Elementen

6.3.3 Dreidimensionaler Kontakt-Patch-Test

Zur Fortsetzung der mit dem zweidimensionalen Kontakt-Patch-Test in Abschnitt 6.3.2 eingeleiteten räumlichen Konsistenzuntersuchungen für die in der vorliegenden Arbeit präsentierte duale mortar-basierte Kontaktdiskretisierungsstrategie soll nun auch der Nachweis für die Übertragung eines räumlich konstanten Spannungsfeldes entlang nicht-konform diskretisierter Kontaktoberflächen anhand eines ähnlichen quasistatischen Verifikationsbeispiels im \mathbb{R}^3 erbracht werden. Damit nicht wie zuvor in Abschnitt 6.3.2, siehe Abb. 6.55c und 6.55d, eine aufwendige Umrechnung der applizierten Druckrandbedingungen auf den Flächenelementen, insbesondere auf den nur partiell mit der Flächenpressung beaufschlagten Facetten, in äquivalente Knotenkräfte durchgeführt werden muss, wird im Folgenden eine einfachere Problemkonfiguration, ein sogenannter modifizierter Kontakt-Patch-Test, verwendet, siehe z. B. auch [Crisfield, 2000; El-Abbasi und Bathe, 2001; Franke, 2014; Dittmann et al., 2014]. Exemplarisch für eine Raumdiskretisierung mit Hexaeder-Elementen ist das Berechnungsmodell mit sämtlichen Last- und Fesselungsbedingungen, die einen einaxialen Deformationszustand inklusive den im \mathbb{R}^3 begleitenden Querkontraktionsmoden für $\mathcal{B}^{h(1)}$ und $\mathcal{B}^{h(2)}$ implizieren, in Abb. 6.58 veranschaulicht. Die unterschiedlich vernetzten quadratischen Blöcke, mit den Abmessungen $L = B = H = 1 \text{ mm}$, werden als elastisch modelliert, wobei für beide Körper $\mathcal{B}^{h(1)}$ und $\mathcal{B}^{h(2)}$ ein schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten vom Neo-Hooke-Typ, mit der einheitlichen Parametrisierung $K = 10^3 \text{ N mm}^{-2}$ und $c_{10} = 0.7 \text{ N mm}^{-2}$, Anwendung findet. Darüber hinaus ist aufgrund der vorliegenden Stationarität für die Berechnung des Kontaktproblems lediglich ein einziger Lastschritt aufzuwenden. Die

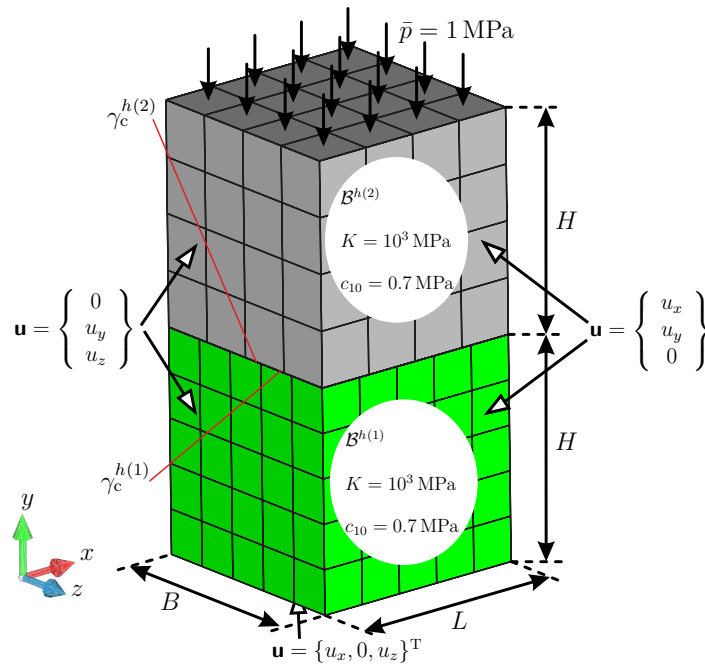


Abbildung 6.58: Problemdefinition des mit Hexaeder-Elementen vernetzten dreidimensionalen Kontakt-Patch-Tests: Geometrie, Belastung, Verschiebungsrandbedingungen, Materialdaten und Diskretisierung

Resultate des dreidimensionalen modifizierten Kontakt-Patch-Tests in Gestalt des absoluten Fehlers $|\sigma_{yy} - \sigma_{yy}^{\text{ref}}|$ für die vertikale Komponente der Cauchy'schen Spannung σ_{yy} , mit $\sigma_{yy}^{\text{ref}} = -1$ MPa, sowie dem Lagrange-Multiplikatorfeld (Kontaktspannungen) im Interface sind exemplarisch für Vernetzungen mit hexaedrischen Elementen den Abb. 6.59 und 6.60 zu entnehmen. Die Abweichungen des aus der einaxialen Deformation resultierenden homogenen Spannungszustands in $\mathcal{B}^{h(1)}$ und $\mathcal{B}^{h(2)}$ liegen im Bereich der Lösungsgenauigkeit für die Primärvariablen, also der Maschinengenauigkeit. Wie eingangs dieses Abschnitts gefordert, ist damit die vorgestellte dreidimensionale mortar-basierte Kontaktdiskretisierungsstrategie in der Lage, einen gleichmäßig verteilten Druck exakt über das nicht-konform diskretisierte Interface zu übertragen. Analoge Nachweise für die anderen Elementtypen sind in Anhang F.1 dokumentiert.

6.3.4 Hertz'sche Pressung

Analytische Lösungen von Kontaktproblemen existieren nur für einfache Spezialfälle. Eine der Bekanntesten geht auf den deutschen Physiker Heinrich Hertz zurück, der in der frühen Veröffentlichung [Hertz, 1881] die Theorie von der sogenannten Hertz'schen Pressung begründet hat. Unter Verwendung der Halbraumnäherung war Hertz in der Lage, für die klassische reibungsfreie Normalkontaktproblematik zwischen schwach gewölbten elastischen Körpern (Zylindern oder Kugeln) die Größe und Form der Berührungsfläche

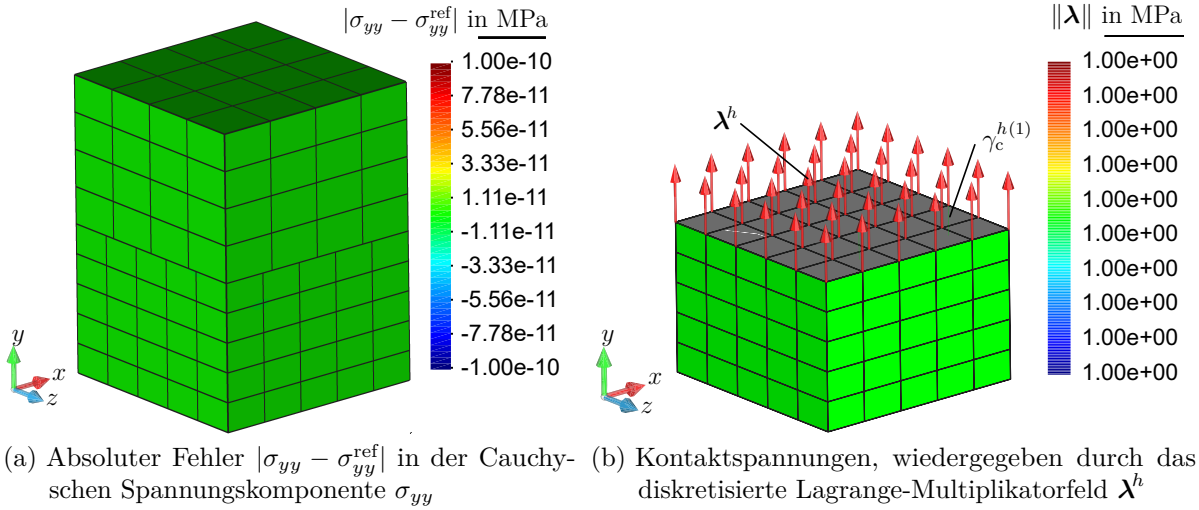


Abbildung 6.59: Darstellung der Resultate des dreidimensionalen Kontakt-Patch-Tests für eine Berechnung mit 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8)

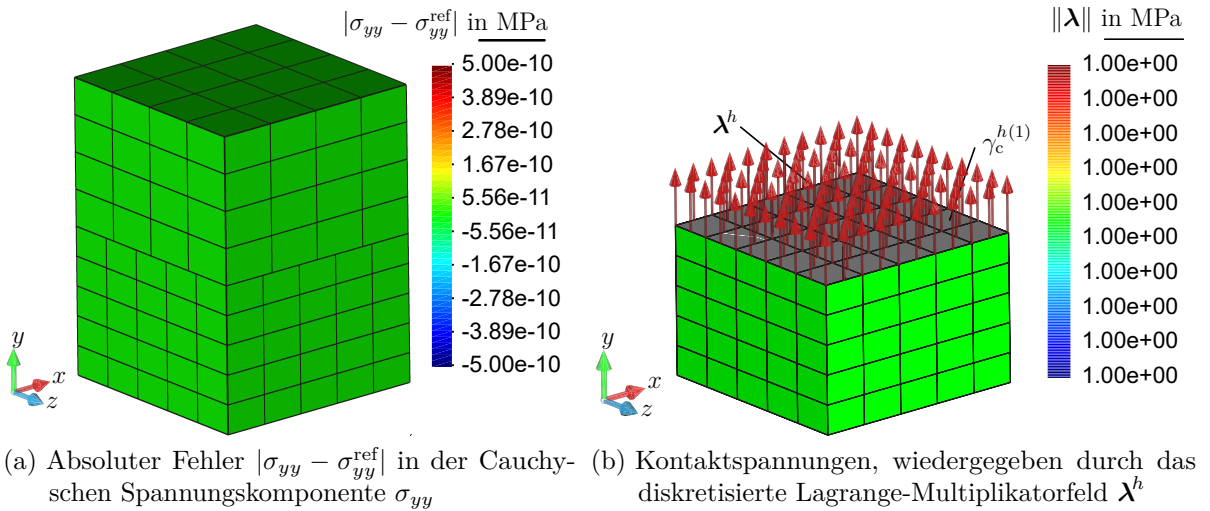


Abbildung 6.60: Darstellung der Resultate des dreidimensionalen Kontakt-Patch-Tests für eine Berechnung mit 20-knotigen quadratischen Hexaeder-Elementen (Hex20)

sowie die Höhe und Verteilung des Drucks unter der Kontaktfläche zu berechnen.³⁹ Weitere Details zur Theorie der Hertzschen Pressung sowie der mit ihr einhergehenden Annahmen und Limitierungen sind den Monographien von Timoschenko und Goodier [1970], Johnson [1985] und Popov [2009] zu entnehmen. Im Folgenden soll die klassische Lösung nach Hertz zur Verifikation der in der vorliegenden Arbeit präsentierten mortar-basierten Kontaktformulierung für große Deformationen genutzt werden. Hierbei ist allerdings anzumerken, dass die analytische Lösung nach Hertz auf den Annahmen der kinematisch linearen Theorie basiert. Infolge dieser offensichtlichen Diskrepanz lassen sich lediglich qualitative Verifikationsaussagen aufstellen und bewerten.

Konkret soll in den nachfolgenden Ausführungen das in Abb. 6.61 schematisch skizzierte dreidimensionale Hertzsche Kontaktproblem untersucht werden. Im Zentrum der Analyse

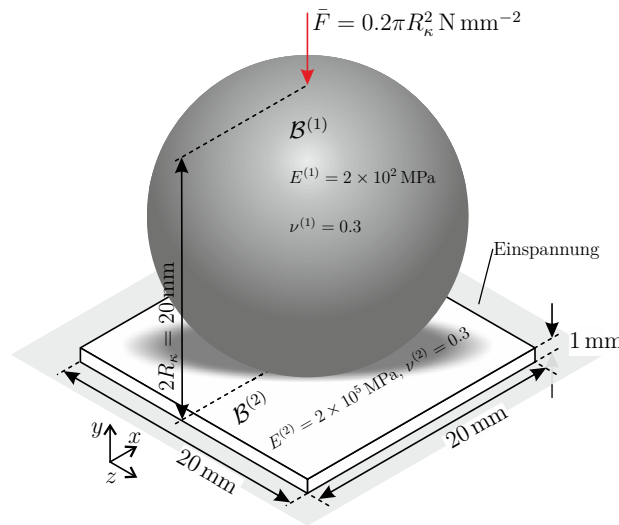


Abbildung 6.61: Hertzsches Kontaktproblem

steht die Berechnung der quasistatischen Kontaktinteraktion zwischen einer deformierbaren elastischen Kugel (Indenter, $\mathcal{B}^{(1)}$), mit dem Radius $R_\kappa = 10 \text{ mm}$, dem Elastizitätsmodul $E^{(1)} = E = 2 \times 10^2 \text{ N mm}^{-2}$ sowie der Querkontraktionszahl $\nu^{(1)} = \nu = 0.3$, und einer starren quadratischen Platte (Fundament, $\mathcal{B}^{(2)}$) unter Einwirkung der Einzelkraft $\bar{F} = 0.2\pi R_\kappa^2 \text{ N mm}^{-2}$, siehe Abb. 6.61. Das Fundament bekommt die elastischen Materialkennwerte $E^{(2)} = 2 \times 10^5 \text{ N mm}^{-2}$ und $\nu^{(2)} = 0.3$ zugewiesen, sodass die postulierte

³⁹Im Rahmen der Halbraumnäherung wird angenommen, dass die Steigung der kontaktierenden Oberflächen im Kontaktgebiet, mit der Ausdehnung R_c , viel kleiner als eins sind. Diese Approximation, die für kleine Verhältnisse von $R_c/R_\kappa \ll 1$, mit dem Krümmungsradius R_κ , hinreichend genau ist, erlaubt es, die Interface-Seiten in erster Näherung als eben und damit als ebene elastische Halbräume zu behandeln. In der allgemeinen Literatur zur Elastizitätstheorie existieren eine Vielzahl von analytischen Lösungen zu Randwertproblemen von elastischen Halbräumen. Diese werden in der Hertzschen Theorie dazu benutzt, um von einem aus der bekannten Kontaktkinematik resultierenden Verschiebungsfeld in lotrechter Richtung zur Halbraumebene auf die analytische Druckverteilung zu schließen. Das Hertzsche Kontaktproblem zeichnet sich durch die Besonderheit aus, dass infolge der einfachen geometrischen Verhältnisse und der Verfolgung der Nichtdurchdringungsbedingungen die Form der Kontaktzone (Kreis oder Ellipse) a priori bekannt ist.

Starrkörpereigenschaft in guter Näherung vorliegt.⁴⁰ Die von der Hertzschen Theorie abgeleitete analytische Lösung ist dann durch die radiale Kontaktdruckverteilung

$$\begin{aligned}
 p_N^{\text{Hertz}}(R) &= p_N^{\max} \sqrt{1 - \left(\frac{R}{R_c}\right)^2}, \quad R \leq R_c, \quad \text{mit} \\
 p_N^{\max} = p_N^{\text{Hertz}}(0) &= \sqrt[3]{\frac{6\bar{F}(E^*)^2}{\pi^3 R_\kappa}} = \sqrt[3]{\frac{3}{2\pi^3(1-\nu^2)^2}} \sqrt[3]{4\pi\bar{p}E^2} \approx 0.388 \sqrt[3]{4\pi\bar{p}E^2}, \quad (6.59) \\
 \frac{1}{E^*} &= \frac{1 - (\nu^{(1)})^2}{E^{(1)}} + \frac{1 - (\nu^{(2)})^2}{E^{(2)}} \Rightarrow E^* \approx \frac{E^{(1)}}{1 - (\nu^{(1)})^2} = \frac{E}{1 - \nu^2},
 \end{aligned}$$

welche sich auf der kreisförmigen Berührungsfläche, mit dem Kontaktradius

$$R_c = \frac{3\bar{F}R_\kappa}{4E^*} \approx \sqrt[3]{\frac{3(1-\nu^2)}{2}} \sqrt[3]{\frac{\pi\bar{p}R_\kappa^3}{2E}} \approx 1.109 \sqrt[3]{\frac{\pi\bar{p}R_\kappa^3}{2E}}, \quad (6.60)$$

ausbildet, charakterisiert, siehe [Johnson, 1985; Popov, 2009].

Um die Genauigkeit der vorgestellten mortar-basierten Kontaktformulierung zu überprüfen, wird das soeben deklarierte Hertzsche Kontaktproblem in einem geometrisch nichtlinearen Berechnungsmodell, siehe Abb. 6.62a, nachgebildet. In Anlehnung an Popp [2012] und Weißenfels [2013] wird die deformierbare Kugel unter Ausnutzung entsprechender Symmetrierandbedingungen als ein Viertel einer Hemisphäre (Halbkugel) modelliert. Geometrie, Verschiebungsrandbedingungen, Lastannahmen und Materialdaten der Teilstrukturen $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$ sind Abb. 6.62a zu entnehmen. Das schwach-inkompressible, hyperelastische Materialverhalten vom Neo-Hooke-Typ ersetzt die im Rahmen der Hertzschen Pressung gültige linear-elastische Materialannahme, sodass es sich bei dem in Abb. 6.62a spezifizierten Randwertproblem (RWP) um ein konsistent aufgestelltes Berechnungsmodell für große Deformationen handelt. Die zugehörige Formänderungsenergie für das hyperelastische Konstitutivmodell ergibt sich aus einer additiven Komposition des zweiten energetischen Ansatzes aus Tab. 2.5 und des isochoren Energieanteils aus der ersten Zeile von Tab. 2.6. Um die Gleichwertigkeit der differierenden Materialannahmen im Bereich kleiner Deformationen herzustellen, werden die $\mathcal{B}^{(1)}$ zugeordneten Werkstoffkennwerte in die Konstanten

$$K^{(1)} = \frac{E^{(1)}}{3(1-2\nu^{(1)})} = \frac{1}{6} \times 10^3 \text{ MPa} \quad \text{und} \quad c_{10}^{(1)} = \frac{E^{(1)}}{4(1+\nu^{(1)})} = \frac{500}{13} \text{ MPa}$$

überführt. Eine kongruente Umrechnung für $\mathcal{B}^{(2)}$ liefert

$$K^{(2)} = \frac{E^{(2)}}{3(1-2\nu^{(2)})} = \frac{1}{6} \times 10^6 \text{ MPa} \quad \text{und} \quad c_{10}^{(2)} = \frac{E^{(2)}}{4(1+\nu^{(2)})} = \frac{5 \times 10^5}{13} \text{ MPa}.$$

⁴⁰Im Rahmen der Hertzschen Theorie ist das quadratische Fundament einer Kugel mit einem unendlich großen Krümmungsradius $R_\kappa \rightarrow \infty$ gleichzusetzen. Außerdem fließt bei der Konstruktion der analytischen Lösung, siehe Gl. (6.59) und (6.60), die Annahme ein, dass der für $\mathcal{B}^{(2)}$ angegebene Wert des Elastizitätsmoduls $E^{(2)} = 2 \times 10^5 \text{ N mm}^{-2}$ gegenüber der $\mathcal{B}^{(1)}$ zugeordneten Materialeigenschaft $E^{(1)} = E = 2 \times 10^2 \text{ N mm}^{-2}$ als unendlich interpretiert werden kann.

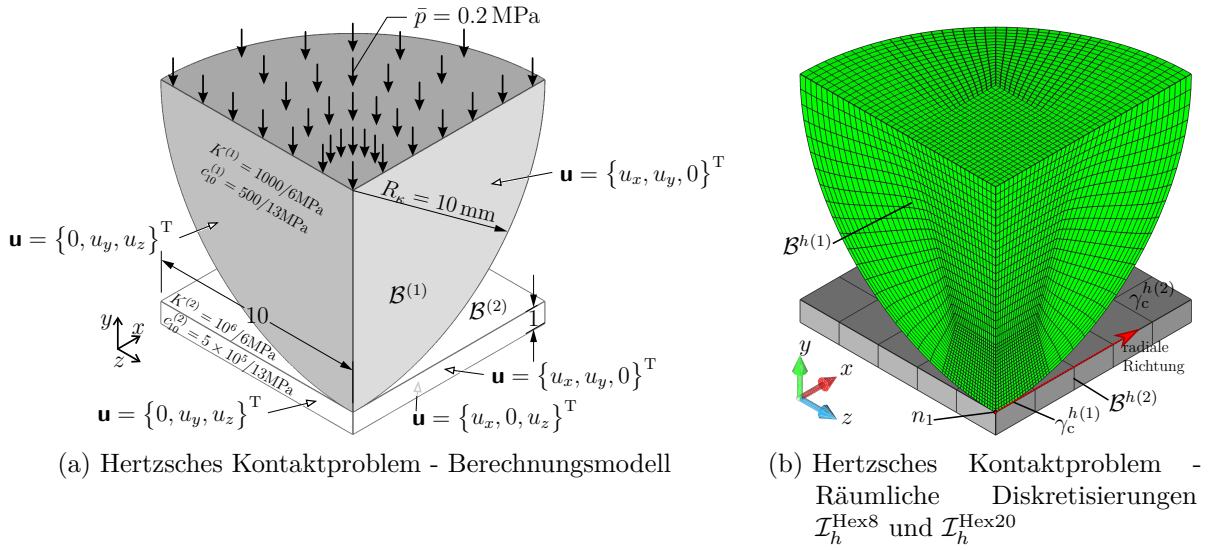


Abbildung 6.62: Hertzches Kontaktproblem - Problemdefinition und Diskretisierung

Zur Herstellung des reibungsfreien Normalkontakts zwischen dem kugelförmigen Indenter und dem sehr viel steiferen Fundament wird an der oberen Schnittfläche der Hemisphäre ein konstanter Druck $\bar{p} = \bar{F}/(\pi R_\kappa^2) = 0.2 \text{ MPa}$ aufgebracht. Indem nur geringe Lasten angesetzt werden, lässt sich die asymptotische Angleichung zwischen der kinematisch linearen analytischen Lösung und dem numerischen Modell für große Deformationen sicherstellen. Obwohl die mechanische Neumann-Randbedingung nicht exakt mit der analytischen räumlichen Spannungsverteilung der deformierbaren Kugel vereinbar ist, stellt sie dennoch eine in guter Näherung gerechtfertigte Lastannahme dar, siehe auch [Yang et al., 2005; Hartmann, 2007; Popp, 2012; Weißenfels, 2013]. Die Applikation von \bar{p} erfolgt in einem einzigen Lastschritt.

Zur adäquaten Abbildung der Druckverteilung in der wegen $R_c/R_\kappa \ll 1$ lokal geprägten Kontaktzone $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ ist es notwendig, den in $\partial_c \chi_t [\mathcal{B}^{(1)}]$ übergehenden Volumenbereich von $\mathcal{B}^{(1)}$ gegenüber dem verbleibenden Strukturanteil relativ fein zu vernetzen. Für $\mathcal{B}^{(2)}$ wird eine deutlich gröbere räumliche Diskretisierung gewählt. Eine entsprechende Gebietszerlegung, mit $n^e = n^{e(1)} + n^{e(2)} = 32\,025$ Kontinuumselementen, zeigt Abb. 6.62b. Die hiervon abgeleitete Oberflächendiskretisierung für das Kontakt-Interface ist durch $n_c^{e(1)} = 400$ und $n_c^{e(2)} = 25$ festgelegt. Um die korrekte Implementierung der vorgestellten mortar-basierten Kontaktformulierung in Kombination mit der Dualen-Lagrange-Multiplikator Interpolation zu bestätigen, wird außerdem ein Vergleich von hexaedrischen Netzen mit linearen und quadratischen Elementtypen (Hex8 und Hex20) durchgeführt, siehe Abb. 6.62b. Tab. 6.10 listet hierfür sämtliche relevanten Details zu den beiden Ausführungen der Raumdiskretisierung, $\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}$ und $\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$, auf. Abb. 6.63 zeigt exemplarisch für die räumliche Parametrisierung $\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$ das zugehörige Verschiebungsfeld und die kompressive Spannungsverteilung in vertikaler Richtung des kugelförmigen Eindringkörpers $\mathcal{B}^{h(1)}$. Zur Abschätzung des einhergehenden Raumdiskretisierungsfehlers bildet Abb. 6.64a den relativen Fehler $\|\mathbf{u}|_{\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}} - \mathbf{u}|_{\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}}\|/\|\mathbf{u}|_{\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}}\|$ zwischen $\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}$ und $\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$ in Bezug auf das Verschiebungsfeld ab. Der maximale Fehler kann dabei in der

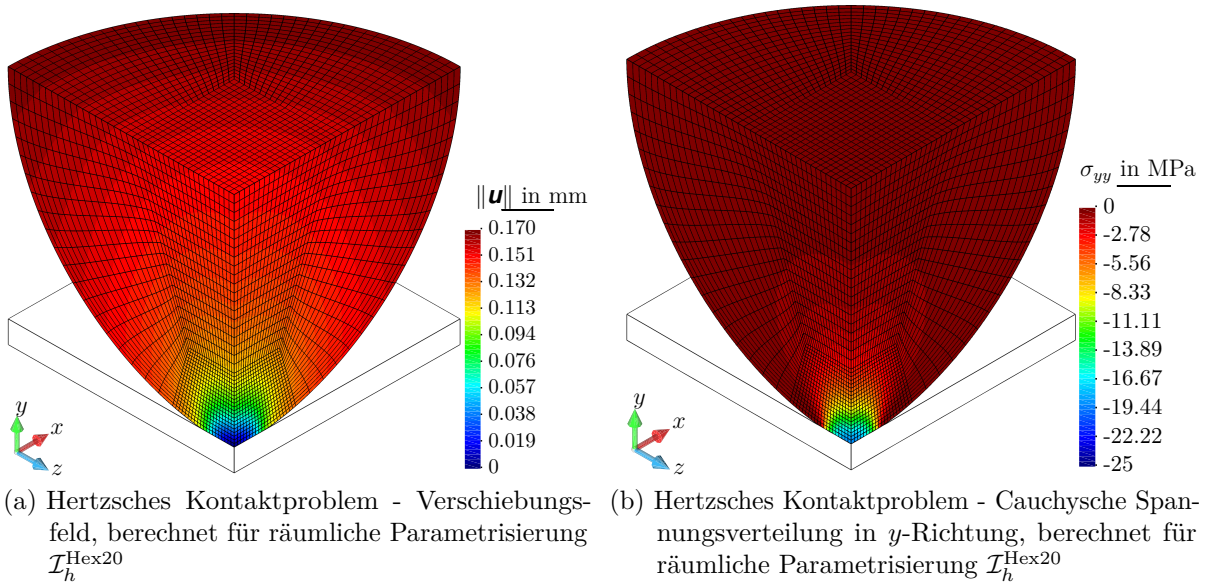


Abbildung 6.63: Hertz'sches Kontaktproblem - Darstellung des Verschiebungsfeldes und der Cauchy'schen Spannungsverteilung in y -Richtung für räumliche Parametrisierung $\mathcal{I}_h^{\text{Hex}20}$, aufgetragen in der Momentankonfiguration

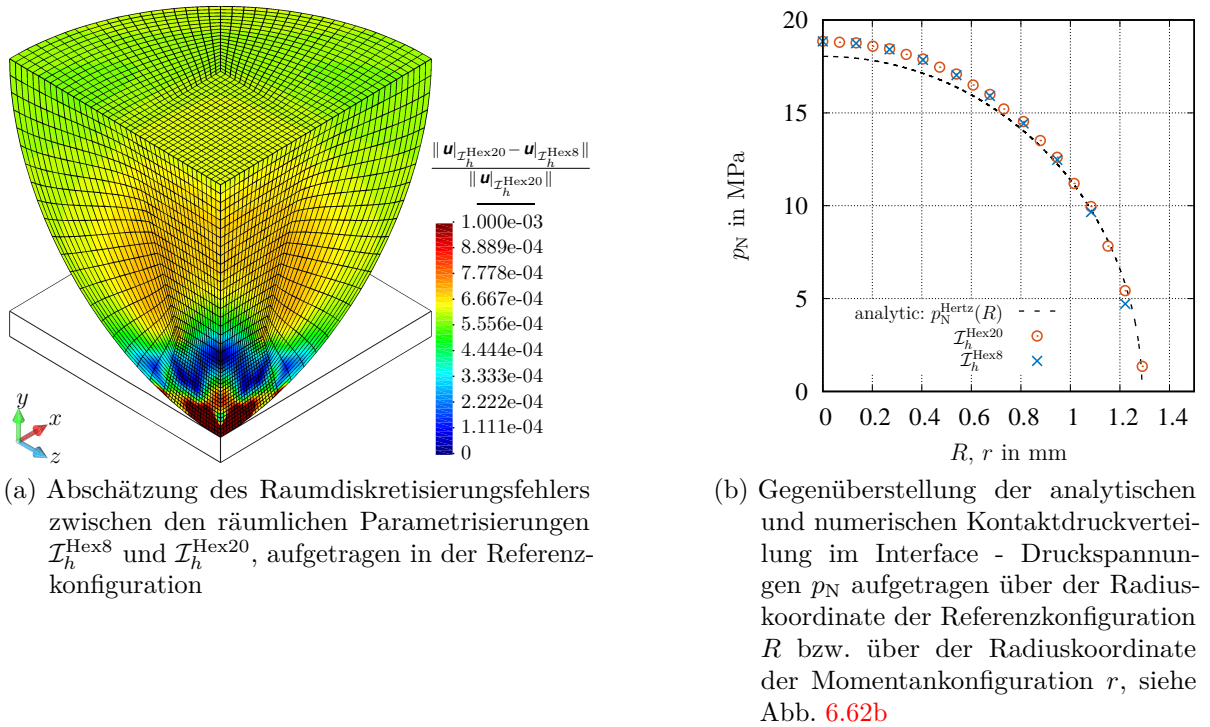


Abbildung 6.64: Hertz'sches Kontaktproblem - Konturgraph des relativen Fehlers $\|\mathbf{u}|_{\mathcal{I}_h^{\text{Hex}20}} - \mathbf{u}|_{\mathcal{I}_h^{\text{Hex}8}}\|/\|\mathbf{u}|_{\mathcal{I}_h^{\text{Hex}20}}\|$ und Darstellung der Kontaktdruckverteilung für die analytische Lösung nach Hertz und die numerischen Verifikationsberechnungen

Tabelle 6.10: Spezifikation der räumlichen Parametrisierungen $\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}$ und $\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$

Netz	$n^{e(1)}$	$n^{e(2)}$	$n^{n(1)}$	$n^{n(2)}$	n_{S}^n	$n_{\text{ua}}^{(1)}$	$n_{\text{ua}}^{(2)}$	$n_{\text{uu}}^{(1)}$	$n_{\text{uu}}^{(2)}$	n_{uuS}
$\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}$	32 000	25	34 481	72	441	103 443	216	101 002	75	1323
$\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$	32 000	25	135 361	228	1281	406 083	684	398 789	384	3843

Umgebung des Strukturbereichs der Kontaktzone lokalisiert werden und liegt unterhalb von einem Prozent. Die Strukturantworten im Fundament bleiben in den Abb. 6.63a, 6.63b und 6.64a ausgeblendet, da diese infolge der groben Diskretisierung von $\mathcal{B}^{h(2)}$ nicht repräsentativ sind. Das primäre Resultat der Verifikation visualisiert Abbildung 6.64b. Hier ist der radiale Verlauf des Kontaktdrucks für die verwendeten Diskretisierungen $\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}$ und $\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$ der klassischen Lösung nach Hertz, siehe Gl. (6.59), gegenübergestellt. Der qualitative Vergleich von analytisch und numerisch berechneter Druckverteilung in Abb. 6.64b enthüllt eine tolerierbare Abweichung, welche auf die Annahme kleiner Deformationen bei der Konstruktion der analytischen Lösung zurückzuführen ist. Nur bei Reduktion der Lastamplitude \bar{p} gelingt es, den Unterschied zwischen der Kontaktdruckverteilung nach Hertz und dem implementierten Kontaktalgorithmus, welcher allgemein für den geometrisch nichtlinearen Bereich gültig ist, weiter zu reduzieren. Zusätzlich ist aus Abb. 6.64b ersichtlich, dass im Randbereich der Kontaktzone die Abweichungen zwischen den räumlichen Parametrisierungen $\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}$ und $\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$ zunehmen. Die Ausdehnung der Kontaktzone für die numerischen Verifikationsberechnungen stimmt gut mit dem analytischen Ausdruck (6.60) überein.

Das behandelte dreidimensionale Hertzsche Kontaktproblem, welches in einem einzigen Lastschritt ausgewertet wird, eignet sich hervorragend zur Demonstration der numerischen Effizienz des in Abschnitt 5.5.5 vorgestellten Primal-Dualen Aktiven-Mengen-Ansatzes vom semiglaten Newton-Raphson-Typ. Dabei fiel die Wahl für den algorithmischen Parameter κ_N innerhalb der nichtlinearen Komplementaritätsfunktion (5.443), wobei κ_N durchaus eine nicht zu unterschätzende Bedeutung hinsichtlich des Einflusses dieses Parameters auf den Konvergenzverlauf des halbglaten Newton-Verfahrens beigemessen werden muss, auf $\kappa_N = 10 \text{ MPa mm}^{-1}$. Charakteristische Resultate dieser Lösungsprozedur zeigt Abb 6.65, in der exemplarisch für die Diskretisierungen $\mathcal{I}_h^{\text{Hex8}}$ und $\mathcal{I}_h^{\text{Hex20}}$ das relative Maß $\|\mathbf{G}_u^{(m)}\|/\|\mathbf{G}_u^{(0)}\|$ des mechanischen Kräfte-residuums und das Verschiebungsinkrement als $\|\Delta \mathbf{U}^{(m)}\|/\|\Delta \mathbf{U}^{(0)}\|$, siehe Abb. 6.65a, sowie die Entwicklung des aktiven Knotensatzes $\mathcal{A}^{(m)}$ in Form der Anzahl aktiver Slave-Knoten n_{uuA} , siehe Abb. 6.65b, in Bezug auf den globalen nichtlinearen Iterationsschritt (m) verfolgt werden. Unabhängig von der verwendeten Interpolationsordnung erkennt die zum Einsatz kommende Primal-Duale Aktive-Mengen-Strategie den korrekten Satz von aktiven Slave-Knoten in den ersten sechs Lösungszyklen. Hiernach, d. h. $m \geq 5$, bleibt $\mathcal{A}^{(m)}$ fixiert und die angewendete iterative Lösungsmethodik reduziert sich auf ein gewöhnliches Newton-Raphson-Verfahren. Wie Abb. 6.65a aufzeigt, sind als Folge hiervon im Rahmen einer exakten konsistenten Linearisierung ab $m \geq 5$ lokal quadratische Konvergenzraten in der Nähe der gesuchten Lösung zu beobachten. Darüber hinaus sei in diesem Zusammenhang darauf hingewie-

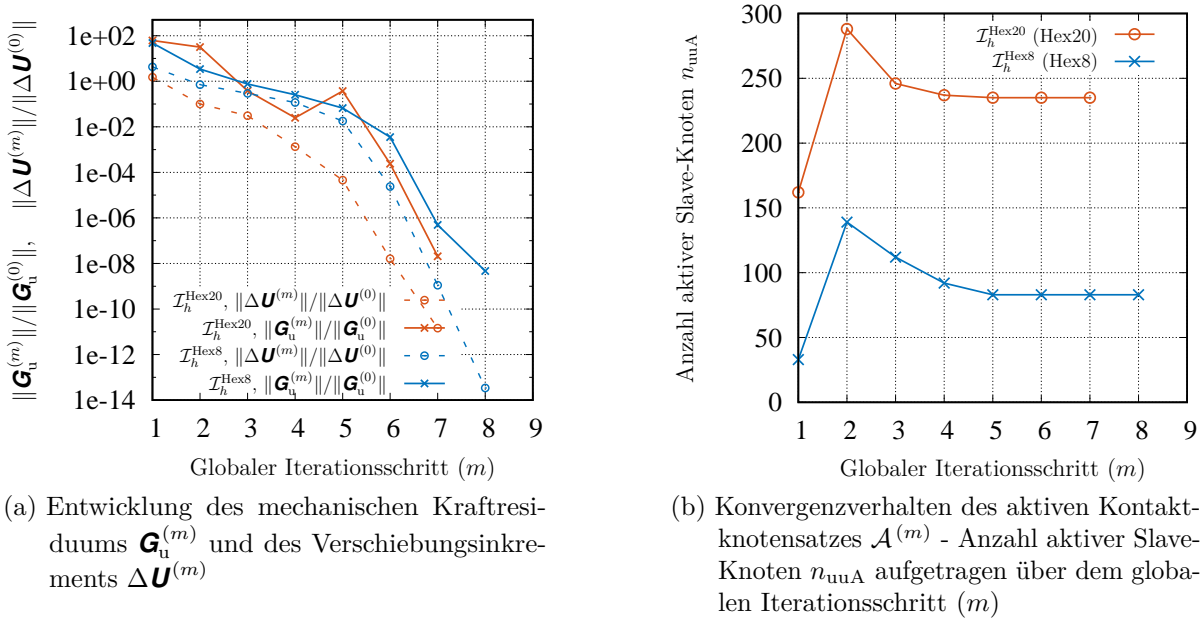


Abbildung 6.65: Hertzisches Kontaktproblem - Konvergenzverhalten des semiglaten Newton-Verfahrens

sen, dass der semiglatte Newton-Algorithmus für das konkrete quasistatische Beispiel nicht mit einer leeren Initialmenge $\mathcal{A}^{(0)} = \emptyset$ gestartet werden kann. Liegt solch ein Fall von abwesenden aktiven Nichtdurchdringungsbedingungen vor, ist der Körper $\mathcal{B}^{h(1)}$ nicht länger in y -Richtung gefesselt. Es resultiert eine singuläre Gesamtsteifigkeitsmatrix, die den iterativen Lösungsprozess zum Divergieren bringt. Abhilfe hierfür schafft ein entsprechender Initialisierungsvektor $\mathbf{U}^{(0)}$, der eine winzige Durchdringung für den untersten Kontaktknoten n_1 der Hemisphäre, siehe Abb 6.62b, herbeiführt. Der für $m = 0$ resultierende Kontaktknotensatz lautet daher $\mathcal{A}^{(0)} = \{n_1\}$, mit $n_{uuA} = 1$.

6.3.5 Raumkonvergenzstudie - Elastische Balken

Eine zentrale Bedeutung bei der Gestaltung der Mortar-Methode nimmt die Forderung nach der Konservierung der Optimalität für die approximierte Lösung ein. So kann auf Basis des von Strang und Fix [1973] gestalteten inf-sup-Konvergenzkriteriums (LBB-Bedingung) für den Diskretisierungsfehler einer FE-Lösung im Raum gezeigt werden, dass die durch eine integrale Oberflächenkopplung charakterisierte mortar-basierte Finite-Elemente-Methode per Konstruktion die LBB-Bedingung erfüllt und bei einer auf das nicht-konform diskretisierte Interface angewendeten Netzverfeinerung zu optimalen räumlichen Konvergenzraten führt. Die Charakterisierung der Optimalität der Raumkonvergenz für die Mortar-Methode ist allerdings vielschichtig und von extrem anspruchsvollen mathematischen Abschätzungstheorien geprägt. Letztere greifen zumeist Annahmen an die Regularität (Glattheit) der Lösung auf und formulieren auf dieser Grundlage Abschätzungsformeln für den Raumdiskretisierungsfehler. Ein ingenieurnaher Einstieg in diese Thematik ist beispielsweise in [Cichosz, 2012] zu finden. Gemäß den

Darstellungen in [Popp, 2012] sollte der räumliche Diskretisierungsfehler in den Verschiebungen, falls eine ausreichende Regularität für das unilaterale Kontaktproblem postuliert werden kann, a priori Konvergenzabschätzungen in Abhängigkeit einer charakteristischen Netzweite h , siehe Abschnitt B.4, und dem Polynomgrad \hat{p} der Größenordnung $\mathcal{O}(h^{\hat{p}+1})$ für die \mathcal{L}^2 -Norm und $\mathcal{O}(h^{\hat{p}})$ in der Energienorm (H^1 -Norm) folgen.⁴¹ Allerdings schränkt die Nichtlinearitätsressource in Gestalt des vorab unbekannten Übergangs zwischen aktiven und inaktiven Kontaktbereichen Annahmen an die Regularität der Lösung (Glattheit der Lösung) erheblich ein. Dies hat zur Folge, dass die zuvor erörterten Konvergenzeigenschaften zumeist nur bei räumlichen Parametrisierungen mit linearen Ansatzfunktionen zu beobachten sind. Die Fehleranalysen für quadratische FE-Diskretisierungen gestalten sich sehr viel filigraner. In [Wohlmuth et al., 2012; Popp et al., 2012] wird für Gebietszerlegungen mit quadratischen Elementen, die zur Interpolation der Lagrange-Multiplikatoren klassische bzw. duale Formfunktionen heranziehen, eine allgemeine obere Schranke von $\mathcal{O}(h^{3/2})$ in der Energienorm, welche bei einer maximal postulierten Regularität zu erwarten ist, angegeben. Für einen umfassenden theoretischen Überblick zu der hochkomplexen mathematischen Thematik der a priori Konvergenzabschätzungen im Rahmen der Mortar-Methode sei auf die Arbeiten von Braess und Dahmen [1998], Braess et al. [1999], Belgacem [1999], Hild [2000], Ben Belgacem [2000], Seshaiyer und Suri [2000a], Seshaiyer und Suri [2000b], Wohlmuth [2000], Hild und Laborde [2002], Hieber et al. [2005], Wohlmuth [2011], Wohlmuth et al. [2012], Drouet und Hild [2015] und Chouly et al. [2016] und die dort zitierte Literatur verwiesen.

Im Folgenden soll das räumliche Konvergenzverhalten der implementierten dualen Mortar-basierten Finiten-Elemente-Methode anhand des in Abb. 6.66a visualisierten zweidimensionalen Kontaktproblems demonstriert werden. Die in Anlehnung an Yang et al. [2005] spezifizierte quasistatische Problemdefinition besteht aus zwei gekrümmten Balken $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$, die wegen der vorgeschriebenen reinen horizontalen Bewegung von $\mathcal{B}^{(2)}$ in reibungslosen Normalkontakt miteinander kommen. Während des ablaufenden Umformvorgangs im Zeitintervall $t \in [0 \text{ s}, 1 \text{ s}]$ bleibt der gegenüberliegende halbkreisförmige Balken $\mathcal{B}^{(1)}$ an beiden Enden fest eingespannt. Der entsprechende Verschiebungslastpfad $\bar{u}_x(t)$, welcher den Umformungsprozess initiiert, ist in Abb. 6.66b veranschaulicht. Für beide Kontaktkörper wird ein schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten vom Neo-Hooke-Typ, mit der Parametrisierung $K = 10^3 \text{ MPa}$ und $c_{10} = 0.7 \text{ MPa}$, gewählt.⁴²

⁴¹Die in Abschnitt B.4 erörterten theoretischen Konvergenzaussagen sind nur eingeschränkt auf ein mit der Mortar-Methode behandeltes Kontaktproblem anwendbar. Die der mortar-basierten Finiten-Elemente-Methode zugrunde liegende nicht-konforme Interfacediskretisierung impliziert neben dem klassischen Raumdiskretisierungsfehler (Approximationsfehler) einen zusätzlichen Konsistenzfehler, welcher den gesamtheitlichen Diskretisierungsfehler dominieren kann. Aus diesem Grund müssen erweiterte Fehlerabschätzungen herangezogen werden, siehe hierzu [Cichosz, 2012] und die dort zitierte Literatur. Bei der Konstruktion optimaler Diskretisierungskopplungen ist es daher von Interesse, den Konsistenzfehler zu minimieren bzw. diesen idealerweise in der Größenordnung des Approximationsfehlers zu belassen. Für den letzteren Fall strebt der totale Raumdiskretisierungsfehler trotz Präsenz des Konsistenzfehlers mit derselben Konvergenzordnung wie bei einer konformen Diskretisierung asymptotisch gegen die exakte Lösung.

⁴²Die zugehörige Formänderungsenergie für das hyperelastische Konstitutivmodell ist durch eine additive Komposition des zweiten energetischen Ansatzes aus Tab. 2.5 und des in der ersten Zeile von Tab. 2.6 aufgeführten isochoren Energieanteils definiert.

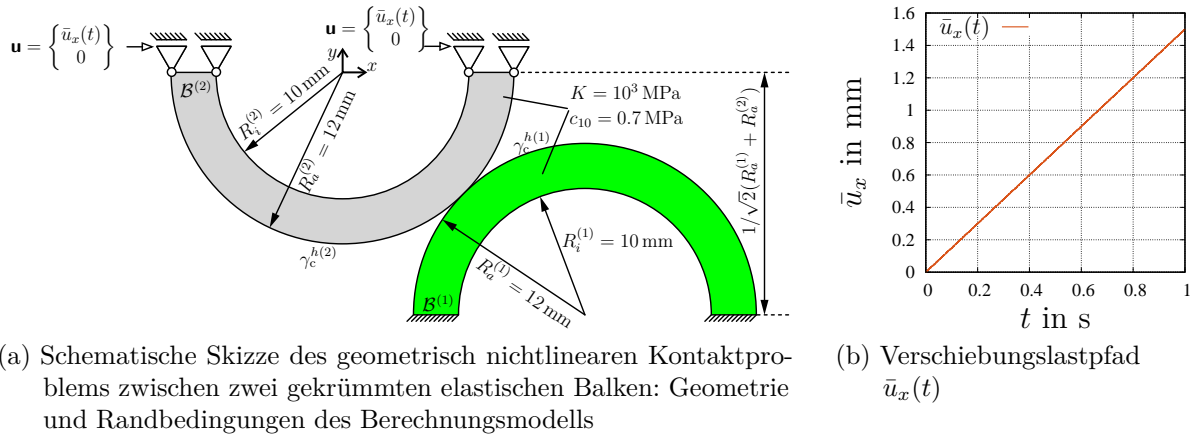


Abbildung 6.66: Problemdefinition des geometrisch nichtlinearen Kontaktproblems zwischen zwei gekrümmten elastischen Balken

Die Entwicklung der biegedominierten Strukturantwort in Gestalt der von Mises Spannungsverteilung, aufgetragen auf den deformierten Konfigurationen der Körper, zur Initialisierung $t = 0$ s sowie den Zeitpunkten $t = 0.33$ s, $t = 0.66$ s und $t = 1$ s zeigt Abb. 6.67. Die zur Erzeugung der Illustrationen 6.67a bis 6.67d verwendete sehr feine Diskretisierung $\mathcal{I}_h^{\text{ref}} = \mathcal{I}_{h_6}^{\text{Quad8}}$, mit 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen, setzt sich aus insgesamt $n^e = n^{e(1)} + n^{e(2)} = 60\,320$ Elementen und $n^n = n^{n(1)} + n^{n(2)} = 184\,138$ Knoten zusammen.

Im Allgemeinen lassen Kontaktprobleme für finite Deformationen die Konstruktion einer analytischen Lösung nicht zu. Aus diesem Grund dient gleichzeitig das auf dem sehr feinen Netz $\mathcal{I}_h^{\text{ref}} = \mathcal{I}_{h_6}^{\text{Quad8}}$ generierte Verschiebungsfeld $\mathbf{u}_{\text{ref}} = \mathbf{u}_{\text{ref}}^h \in \mathbb{R}^2$ als Referenzlösung zur Berechnung des mit der \mathcal{L}^2 -Norm $\|\mathbf{u}_{\text{ref}} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{L}^2} / \|\mathbf{u}_{\text{ref}}\|_{\mathcal{L}^2}$ und der Energienorm $\|\mathbf{u}_{\text{ref}} - \mathbf{u}^h\|_E / \|\mathbf{u}_{\text{ref}}\|_E$ gemessenen Raumdiskretisierungsfehlers der Verschiebungen. Weitere Erörterungen zu diesen relativen Fehlermaßen und der numerischen Auswertung mit Hilfe des Berechnungskonzepts I werden in Abschnitt B.4 nachgereicht. Zur Durchführung der Raumkonvergenzstudie werden jeweils beide Körper mit 4-knotigen linearen (Quad4) oder 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad8) diskretisiert. Die sechs unterschiedlich gewählten Vernetzungsgrade sind in den Abb. 6.68 und 6.69 zusammen mit der resultierenden von Mises Spannungsverteilung der Diskretisierungen $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad4}}$, $k = 1, \dots, 6$, bzw. $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad8}}$, $k = 1, \dots, 6$, zum Zeitpunkt $t = 1$ s veranschaulicht, wobei das für den materiellen Körper $\mathcal{B}^{h(2)}$ mit gleicher Vernetzungsintensität, d. h. $h^{(1)}/h^{(2)} = 1$, konstruierte Netz zur Charakterisierung der Ergebnisse ausgeblendet wird. Der Vernetzungsgrad, ausgedrückt mit Hilfe einer gemittelten Elementlänge h , variiert in den Grenzen $h = 2.4$ mm bis $h = 7 \times 10^{-2}$ mm.

Die Resultate der zum letzten Lastschritt für $t = 1$ s ausgewerteten Raumkonvergenzstudie zeigt Abb. 6.70. Bei der Interpretation der Verläufe der einzelnen Konvergenzgraphen, wobei zunächst auf Elemente mit linearer Interpolationsordnung (Quad4) Bezug genommen werden soll, ist zu erkennen, dass diese mit den oben angegebenen a priori Abschätzungen gut übereinstimmen. Insbesondere der blaue Graph aus Abb. 6.70b (Quad4)

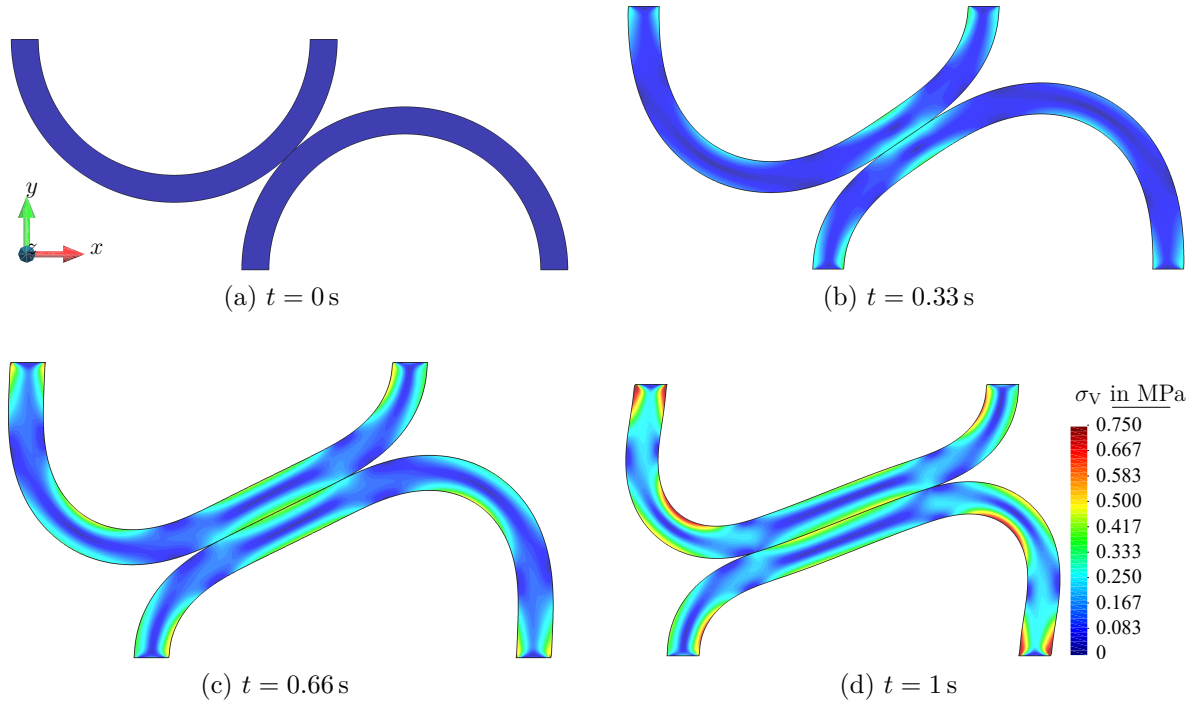


Abbildung 6.67: Konturgraph der von Mises Spannungsverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten innerhalb $t \in [0 \text{ s}, 1 \text{ s}]$, ausgewertet für $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$

bestätigt die optimale, in Bezug auf die Energienorm realisierbare Konvergenzordnung $\mathcal{O}(h)$. Der entsprechende Verlauf für den Raumdiskretisierungsfehler in der \mathcal{L}^2 -Norm weicht dagegen geringfügig von der theoretischen Konvergenzrate $\mathcal{O}(h^2)$ ab. Es wird jedoch davon ausgegangen, dass sich der blaue Konvergenzgraph bei weiterer sukzessiver Verfeinerung der Vernetzung asymptotisch an die schwarz gestrichelte Linie, welche eine optimale Konvergenzcharakteristik beschreibt, anschmiegt. Die Analyse auf die quadratischen Elemente gerichtet, offenbart ebenfalls eine hervorragende Affinität mit der Theorie. So stimmt das Resultat aus Abb. 6.70b nahezu perfekt mit der Erwartung von $\mathcal{O}(h^{3/2})$ überein. Nach Kenntnisstand des Autors der vorliegenden Monographie existieren für eine quadratische Finite-Elemente-Interpolation in Kombination mit dualen Ansatzfunktionen für die Lagrange-Multiplikatoren keine a priori Konvergenzabschätzungen für einen in der \mathcal{L}^2 -Norm erfassten Raumdiskretisierungsfehler des Verschiebungsfeldes, sodass zu diesem Verlauf in Abb. 6.70a (Quad8) keine Interpretationen ergänzt werden können. Auffällig ist jedoch, sowohl in Abb. 6.70a als auch in Abb. 6.70b die erheblich reduzierte Fehlerkonstante des quadratischen Elementansatzes gegenüber dem linearen Pendant. Abschließend sei angemerkt, dass sich die dargestellten Resultate dieses Abschnitts mit den Ergebnissen der Konvergenzstudien aus [Hüeber et al., 2005; Puso et al., 2008; Tur et al., 2009; Cichosz und Bischoff, 2011; Wohlmuth, 2011; Tur et al., 2012; Popp, 2012; Popp et al., 2012] decken. Hieraus wird die Schlussfolgerung gezogen, dass eine korrekte Implementierung der vorgestellten mortar-basierten Kontaktformulierung vorliegt.

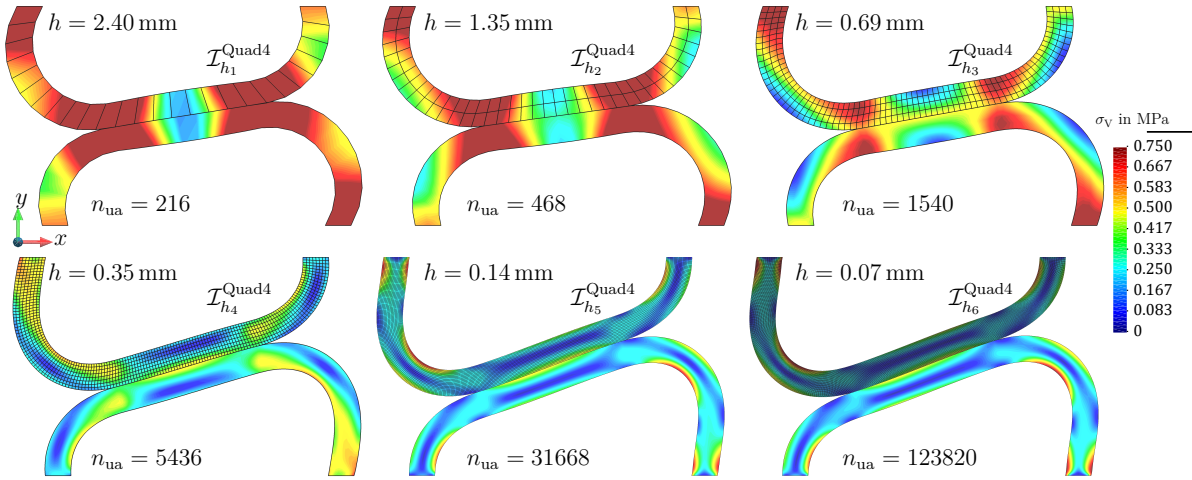


Abbildung 6.68: Konturgraphen der von Mises Spannungsverteilung für eine sukzessive verfeinernde Sequenz von Vernetzungen, mit 4-knotigen linearen Viereck-Elementen (Quad4), ausgewertet zum Zeitpunkt $t_n = 1$ s

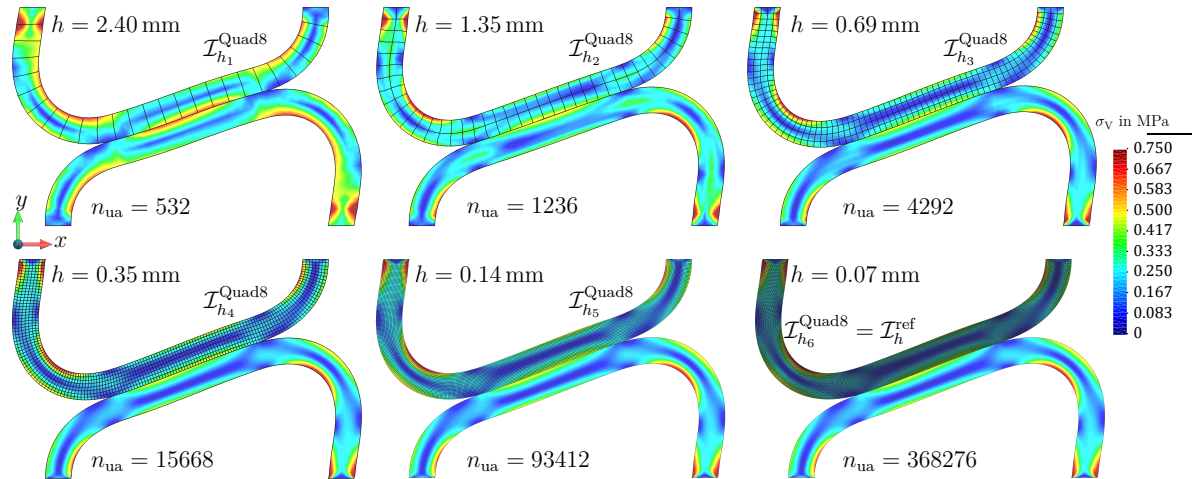
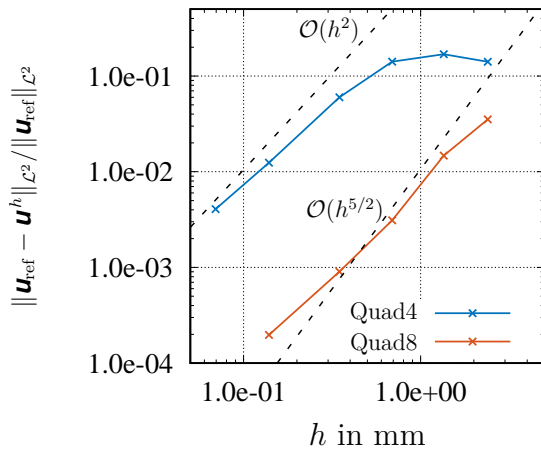
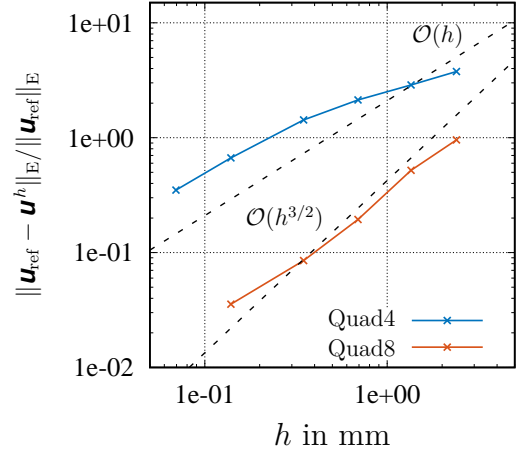


Abbildung 6.69: Konturgraphen der von Mises Spannungsverteilung für eine sukzessive verfeinernde Sequenz von Vernetzungen, mit 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad8), ausgewertet zum Zeitpunkt $t_n = 1$ s



(a) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler in der \mathcal{L}^2 -Norm



(b) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler in der Energienorm

Abbildung 6.70: Kontaktproblem zwischen zwei gekrümmten elastischen Balken - Konvergenzanalyse zum Raumdiskretisierungsfehler des Verschiebungsfelds bei gleichmäßiger Netzverfeinerung für Diskretisierungen mit 4-knotigen linearen (Quad4) oder 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad8)

6.3.6 Dreidimensionaler Eindruckversuch

Der folgende Abschnitt dient dazu, einen Nachweis für die korrekte Implementation der dreidimensionalen mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie, mit dualen Ansatzfunktionen, in dem *Inhouse-Code Tasafem* zu erbringen. Im Vordergrund dieser Untersuchung steht die Prüfung der Funktionalität der vorgestellten mortar-basierten Finite-Elemente-Methode mit sämtlichen in dieser Arbeit behandelten Elementtypen. Zu diesem Zweck wird das in Abb. 6.71 visualisierte Kontaktproblem betrachtet. Die in Anlehnung an die Arbeiten von Puso und Laursen [2004a], Puso und Laursen [2004b] und Popp et al. [2010] spezifizierte quasistatische Problemdefinition setzt sich aus einem halbzylindrischen Gesenk $\mathcal{B}^{(2)}$ und einem quaderförmigen Fundament $\mathcal{B}^{(1)}$ zusammen. Gemäß des in Abb. 6.71b veranschaulichten Lastpfads wird der sehr steife Stempel durch die Verschiebungsrandbedingung $\bar{u}_y(t)$ auf den oberen Flächen von $\mathcal{B}^{(2)}$ in den weichen Untergrund $\mathcal{B}^{(1)}$ hinein gedrückt. Zeitgleich bewegt sich infolge der in horizontaler Richtung aufgetragenen Verschiebung $\bar{u}_x(t)$ das Gesenk auf die Mitte von $\mathcal{B}^{(1)}$ zu. Damit das Fundament $\mathcal{B}^{(1)}$ nicht wegdriftet, ist dieses innerhalb des betrachteten Zeitintervalls $t \in [0 \text{ s}, 1 \text{ s}]$ vollständig am Boden fixiert. Die Kontaktinteraktion zwischen den Körpern $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$ verläuft reibungslos. Außerdem werden beide Kontaktpartner durch ein schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten beschrieben, deren Parametrisierung den Tab. 6.11 und 6.12 zu entnehmen ist.

Das Endstadium des Umformungsprozesses zum Zeitpunkt $t = 1 \text{ s}$, mit dem sich ausbildenden Verschiebungsfeld in vertikaler Richtung im Fundament $\mathcal{B}^{h(1)}$, zeigt Abb. 6.72. Um sämtliche Bereiche von $\mathcal{B}^{h(1)}$ sichtbar zu machen, wird die Strukturantwort von $\mathcal{B}^{h(2)}$ ausgeblendet. Die Strukturantwort von $\mathcal{B}^{h(2)}$ wäre zudem aufgrund der gering gewähl-

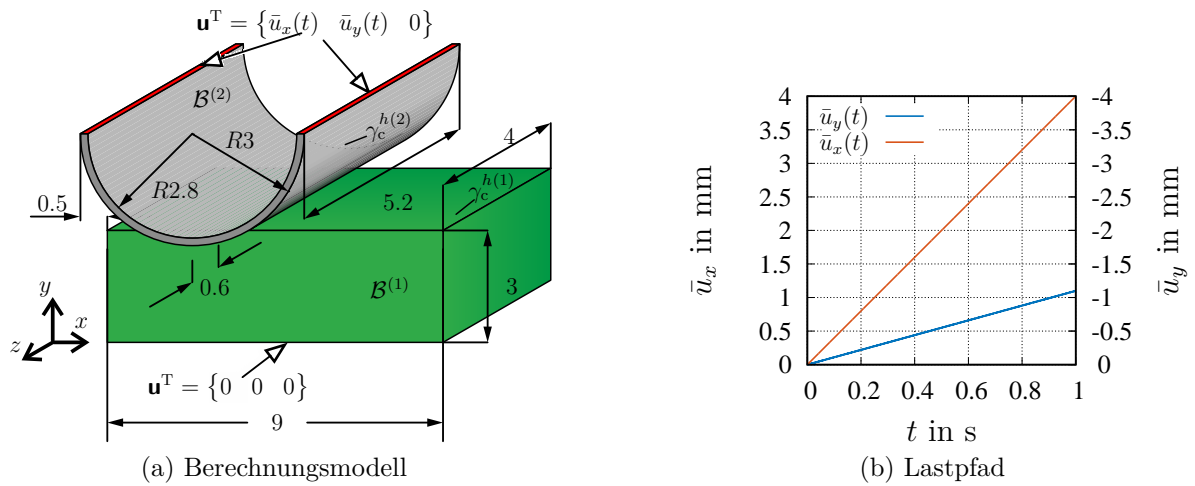


Abbildung 6.71: Problemdefinition des geometrisch nichtlinearen Eindruckversuchs zwischen einem halbzylindrischen Gesenk und einem quaderförmigen Fundament

Tabelle 6.11: Parametrisierung des dem Fundament $\mathcal{B}^{(1)}$ zugewiesenen Materialverhaltens - Parametrisierung für schwach-inkompressibles, hyperelastisches Konstitutivmodell, mit einer aus dem zweiten Ansatz von Tab. 2.5 und dem dritten Ansatz von Tab. 2.6 zusammengesetzten Formänderungsenergie

K N/mm ²	c_{10} N/mm ²	c_{01} N/mm ²	c_{30} N/mm ²
10^3	0.264	0.5	1.9×10^{-2}

ten räumlichen Auflösung nicht verwertbar. Weitere Felddarstellungen zur von Mises Spannungsverteilung und der Lagrange-Multiplikatorverteilung im Interface sind im Abschnitt F.2 hinterlegt. Aus der Betrachtung der Ergebnisse von Abb. 6.72 lässt sich ableiten, dass die implementierte mortar-basierte Kontaktdiskretisierungsstrategie in Verbindung mit sämtlichen in dieser Arbeit betrachteten Elementtypen in Lage ist, den dreidimensionalen Eindruckversuch zu simulieren. Weiterhin wird deutlich, dass infolge der Querkontraktion von $\mathcal{B}^{h(1)}$ während des Deformationsprozesses partiell integrierte Slave-Elemente entstehen. Das untersuchte Beispiel demonstriert damit auf elegante Art und Weise die Notwendigkeit für einen segmentbasierten Konstruktionsansatz der dualen Ansatzfunktionen. Weitere Details hierzu können Abschnitt 5.5.4.2 entnommen werden. Als abschließende Bemerkung sei angefügt, dass für die Berechnung mit 27-knotigen quadratischen Hexaeder-Elementen (Hex27), siehe Abb. 6.72c, die in Abschnitt 5.9 vorgestellte Skalierungstechnik zum Einsatz gekommen ist. Ohne die zusätzliche Skalierung traten während der Berechnung Konvergenzprobleme auf, die zu einem Abbruch der Simulation führten.

Tabelle 6.12: Parametrisierung des dem Gesenk $\mathcal{B}^{(2)}$ zugewiesenen Materialverhaltens - Parametrisierung für schwach-inkompressibles, hyperelastisches Konstitutivmodell, mit einer aus dem zweiten Ansatz von Tab. 2.5 und dem ersten Ansatz von Tab. 2.6 zusammengesetzten Formänderungsenergie

K N/mm ²	c_{10} N/mm ²
1.75×10^5	4.04×10^4

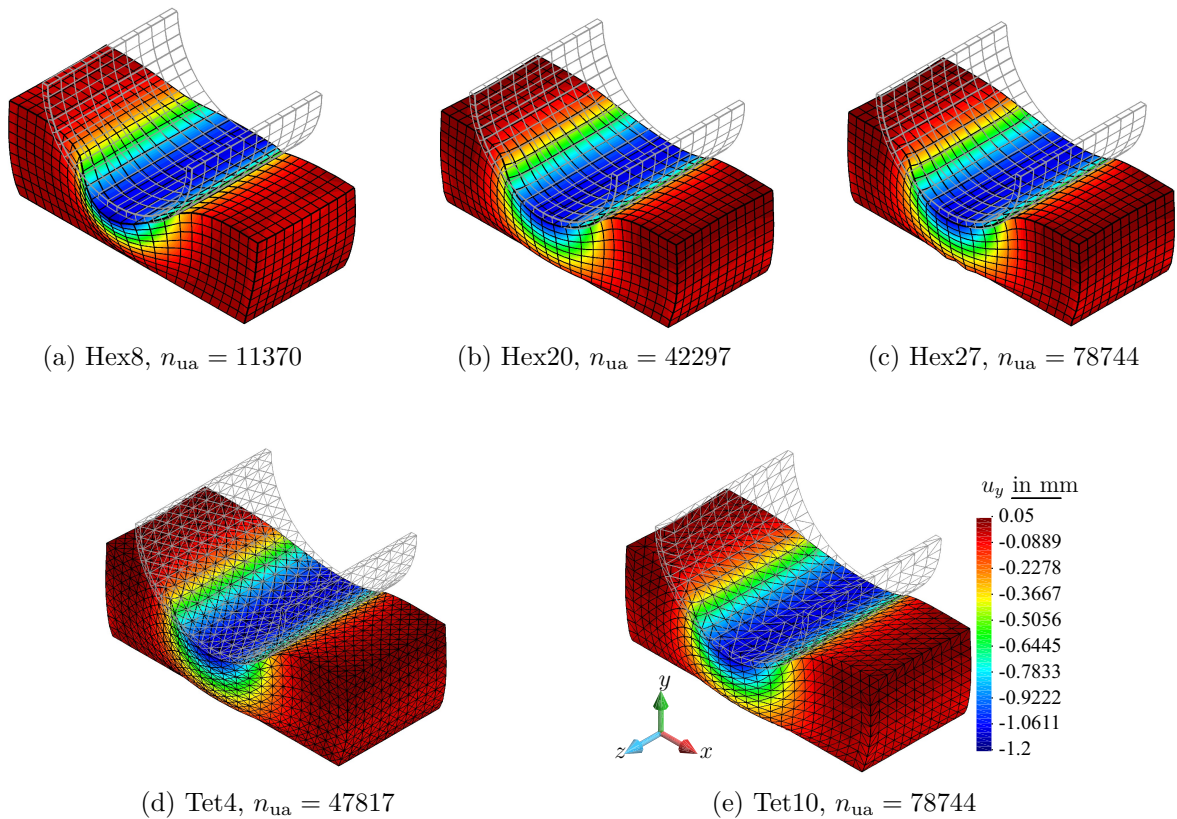


Abbildung 6.72: Dreidimensionaler Eindruckversuch, ausgewertet für verschiedene Elementtypen - Darstellung des Verschiebungsfeldes in vertikaler Richtung zum Zeitpunkt $t_n = 1$ s

6.3.7 Zeitkonvergenzstudie - Dreidimensionaler Eindruckversuch

Als Fortsetzung der Ausführungen zum vorigen Abschnitt 6.3.6 wird das in Abb. 6.71 veranschaulichte Kontaktproblem einer Ordnungsanalyse im Zeitbereich unterzogen. Hierzu ist es allerdings zuvor notwendig, das in Abschnitt 6.3.6 spezifizierte Randwertproblem in eine Anfangs-Randwertaufgabe zu überführen. Dies gelingt, indem das elastische Materialverhalten des Fundaments $\mathcal{B}^{(1)}$ durch ein ratenabhängiges Konstitutivmodell der finiten Viskoelastizität, siehe Abschnitt 2.5.3.2, substituiert wird. Tab. 6.13 fasst die Para-

Tabelle 6.13: Parametrisierung des dem Fundament $\mathcal{B}^{(1)}$ zugewiesenen Materialverhaltens - Parametrisierung für das in Abschnitt 2.5.3.2 wiedergegebene finite Viskoelastizitätsmodell nach Hartmann [2003]

K	c_{10}	c_{01}	c_{30}	μ	η_0	s
N/mm ²	N/mm ²	N/mm ²	N/mm ²	N/mm ²	N s/mm ²	MPa ⁻¹
10^3	0.264	0.5	1.9×10^{-2}	0.2	180	10^{-3}

metrisierung des für $\mathcal{B}^{(1)}$ verwendeten Materialmodells zusammen. Mit Ausnahme dieser Anpassung behalten jedoch sämtliche Aussagen zur Definition des Berechnungsmodells aus Abschnitt 6.3.6 ihre Gültigkeit.

Wegen der hohen Robustheit von Elementen mit linearer Interpolationsordnung in Bezug auf die in der vorliegenden Arbeit verfolgte mortar-basierte Kontaktdiskretisierungsstrategie werden zur Diskretisierung des Kontakt-Interface Viereckselemente mit linearen Ansatzfunktionen gewählt. Dies impliziert an die Volumendiskretisierung die Verwendung von 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8). Um außerdem das Auftreten von Locking-Effekten infolge des nahezu-inkompressiblen Materialverhaltens von $\mathcal{B}^{(1)}$ zu vermeiden, werden anstatt reinen verschiebungsbezogenen Elementen gemischte Elemente vom Q1P0-Typ zur Diskretisierung der Kontinua $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$ herangezogen. Die Vernetzung ist durch die Diskretisierungsparameter $n^e = 3340$, $n^n = 3790$, $n_{\text{ua}} = 11\,370$, $n_{\text{uu}} = 10\,266$ und $n_{\text{up}} = 1104$ festgelegt.

Die Basis für die durchzuführende temporale Konvergenzstudie bildet eine hochgenaue numerische Referenzlösung mit dem Alexander/Cash Verfahren (Alex3/Cash) und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 2.5 \times 10^{-4}$ s. Die Resultate der zum letzten Zeitschritt für $t = 1$ s ausgewerteten Strukturantwort der Referenzlösung zeigt Abb. 6.73. Weiterhin wird das Konvergenzverhalten nur in Bezug auf die betrachteten DIRK-Verfahren, siehe Tab. D.1, analysiert, da es sich um die Berechnung einer quasistatischen Kontaktinteraktion handelt. Die konstanten Zeitschrittweiten stammen aus dem limitierten Satz

$$\Delta t_n = \{2.50 \times 10^{-2} \text{ s}, 1.25 \times 10^{-2} \text{ s}, 5.00 \times 10^{-3} \text{ s}, 2.50 \times 10^{-3} \text{ s}, 1.00 \times 10^{-3} \text{ s}\}.$$

Die Verläufe der Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q , siehe Definitionen (6.1)₁ und (6.2)₂, sind in den Abb. 6.74a und 6.74b über der Zeitschrittweite Δt_n grafisch veranschaulicht. Es zeigt sich deutlich, dass im Rahmen des betrachteten dreidimensionalen Eindruckversuchs die beobachtete Konsistenzordnung des Verfahrens nach Alexander/Cash (Alex3/Cash) sowohl in Abb. 6.74a als auch in Abb. 6.74b von der theoretisch realisierbaren Konvergenzordnung $p = 3$ abweicht. Alle übrigen Verfahren, d. h. Verfahren mit $p \leq 2$, verhalten

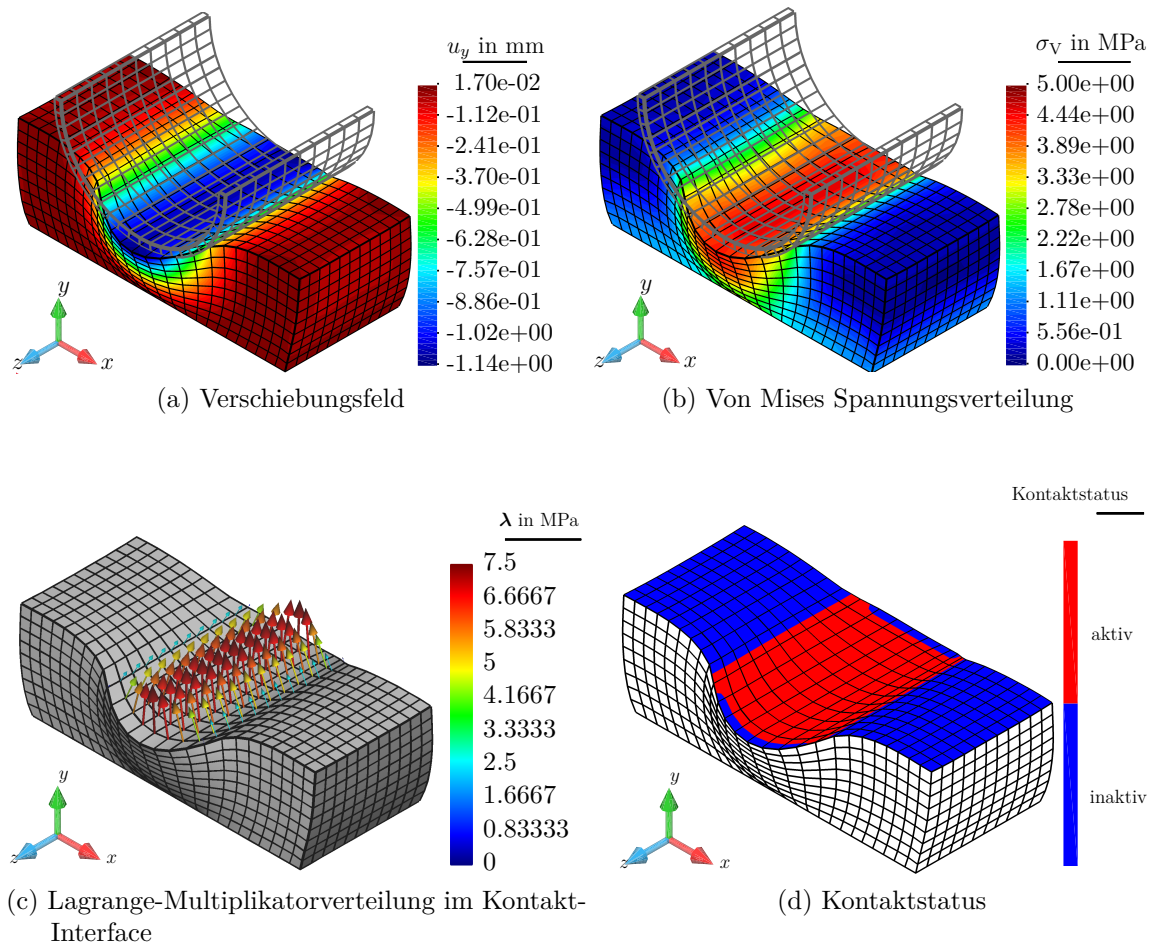
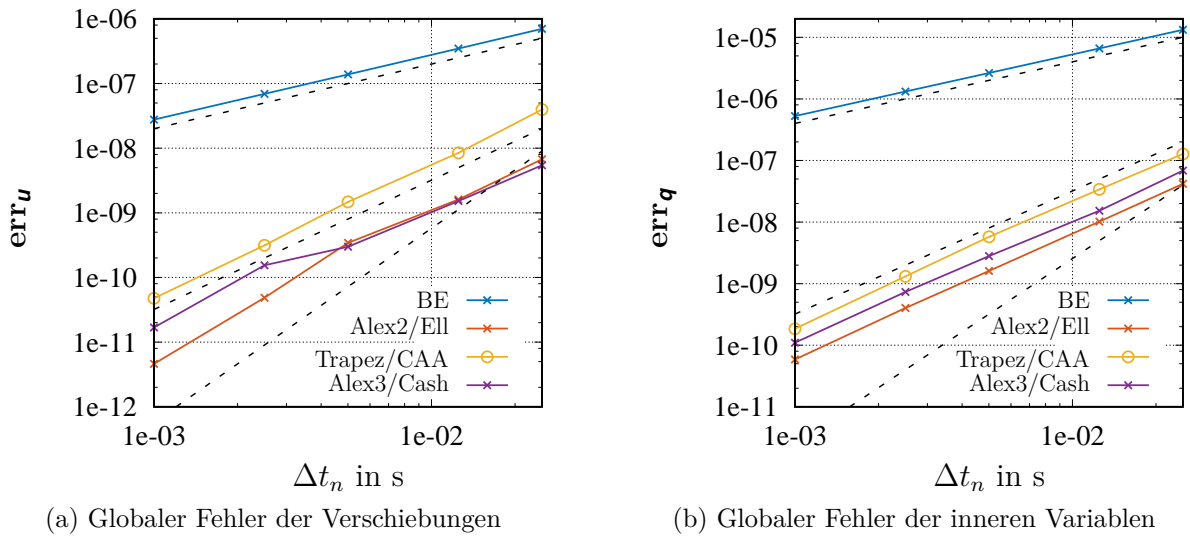


Abbildung 6.73: Dreidimensionaler Eindruckversuch - Darstellung des Verschiebungsfeldes in y -Richtung, der von Mises Spannungsverteilung, der Lagrange-Multiplikatorverteilung im Kontakt-Interface und des Kontaktstatus (aktiver oder inaktiver Slave-Knoten) für die Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 2.5 \times 10^{-4}$ s) zum Zeitpunkt $t = 1$ s



Abbildungung 6.74: Ordnungsdiagramme für den dreidimensionalen Eindruckversuch - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n

sich konform zur Theorie. Damit bestätigt die in diesem Abschnitt durchgeführte Ordnungsanalyse die Aussagen aus Abschnitt 6.3.1.

6.3.8 Zeitkonvergenzstudie - Zweidimensionaler Eindruckversuch

Im folgenden Abschnitt werden ein reibungsloses und ein reibungsbehaftetes Kontaktproblem einer Ordnungsanalyse im Zeitbereich unterzogen. Dazu wird der Eindruckversuch aus den beiden vorherigen Abschnitten 6.3.6 und 6.3.7 in vereinfachter Form erneut aufgegriffen. Abb. 6.75 zeigt die Ausgangskonfiguration für die Simulation eines quasistatischen zweidimensionalen Umformprozesses zwischen einem abgerundeten Umformwerkzeug $\mathcal{B}^{(1)}$ und einem rechteckförmigen Block $\mathcal{B}^{(2)}$. Der steife elastische Stempel $\mathcal{B}^{(1)}$ wird gemäß der in Abb. 6.75c veranschaulichten nichtlinearen Lastpfadverläufe $\bar{u}_y(t)$ und $\bar{u}_x(t)$, welche als Verschiebungsrandbedingung auf die zum Kontakt-Interface abgewandte Seite von $\mathcal{B}^{(1)}$ aufgebracht werden, in einen weichen viskoelastischen Elastomerblock $\mathcal{B}^{(2)}$ eingedrückt. Während die Verschiebungsrandbedingung

$$-\bar{u}_y(t) = \begin{cases} \bar{g}_y(t) = \sum_{i=0}^5 a_i \tau^i, & t_0 \leq t < t_i \\ \bar{h}_y(t) = 1.5 \text{ mm}, & t_i \leq t \leq t_e, \end{cases}$$

mit $\tau(t) = (t - t_0)/(t_i - t_0)$, $t_0 = 0 \text{ s}$, $t_e = 1 \text{ s}$, $t_i = 0.2 \text{ s}$ und

$$\mathbf{a}^T = \{a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} = \{0, 0, 0, 15, -22.5, 9\} \text{ mm},$$

die vertikale Eindringung reguliert, initiiert zeitgleich die Randbedingung in horizontaler Richtung

$$\bar{u}_x(t) = \begin{cases} \bar{g}_x(t) = 0 \text{ mm}, & t_0 \leq t < t_i \\ \bar{h}_x(t) = \sum_{i=0}^5 a_i \tau^i, & t_i \leq t \leq t_e, \end{cases}$$

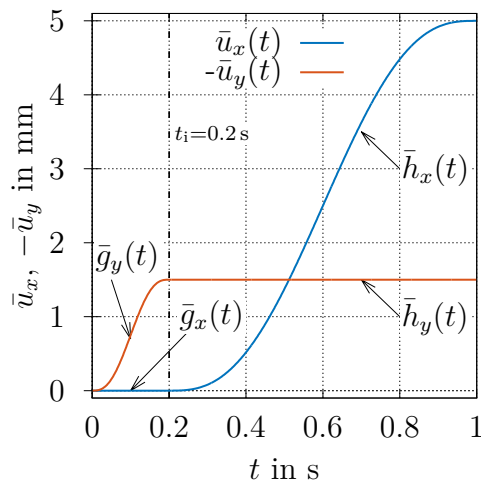
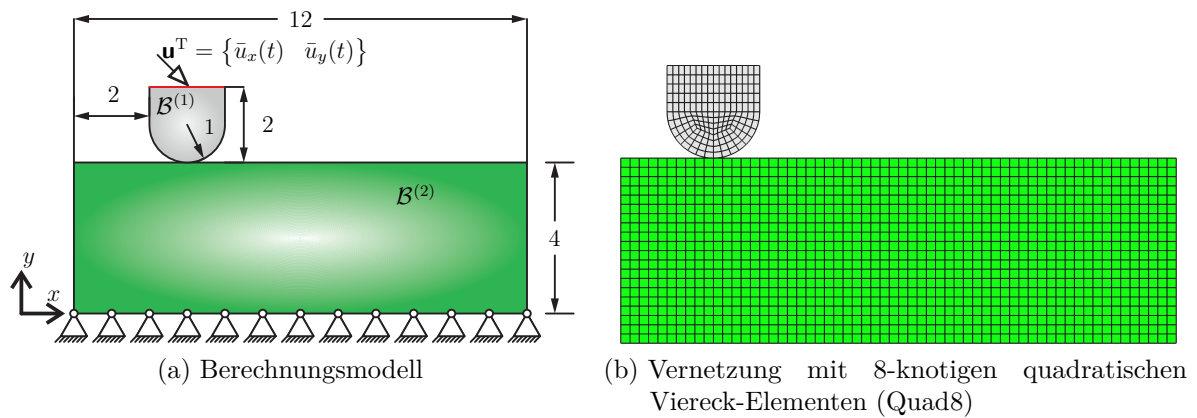


Abbildung 6.75: Problemdefinition des zweidimensionalen geometrisch nichtlinearen Eindruckversuchs zwischen einem abgerundeten Umformwerkzeug und einem rechteckförmigen Fundament

mit $\tau(t) = (t - t_0)/(t_i - t_0)$, $t_0 = 0$ s, $t_e = 1$ s, $t_i = 0.2$ s und

$$\mathbf{a}^T = \{a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} = \{0, 0, 0, 50, -75, 30\} \text{ mm},$$

einen Walkvorgang in dem viskoelastischen Fundament $\mathcal{B}^{(2)}$.⁴³ Damit der Block $\mathcal{B}^{(2)}$ während des Umformprozesses nicht wegdriftet, ist dieser innerhalb des betrachteten Zeitintervalls $t \in [0 \text{ s}, 1 \text{ s}]$ vollständig am Boden fixiert. Wie zuvor angedeutet, wird dem abgerundetem Gesenk $\mathcal{B}^{(1)}$ ein elastisches Materialverhalten zugewiesen. Konkret fällt die Wahl auf ein schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten vom Neo-Hooke-Typ, mit der Parametrisierung $K = 10^3$ MPa und $c_{10} = 0.7$ MPa. Um eine Anfangs-Randwertaufgabe auch bei der Betrachtung eines quasistatischen, reibungslosen Kontaktproblems zu kreieren, wird das Materialverhalten des Fundaments $\mathcal{B}^{(2)}$ durch das Konstitutivmodell der finiten Viskoelastizität, siehe Abschnitt 2.5.3.2, abgebildet. Tab. 6.14 fasst die Parametrisierung des für $\mathcal{B}^{(2)}$ verwendeten Materialmodells zusammen.

Tabelle 6.14: Parametrisierung des dem Fundament $\mathcal{B}^{(2)}$ zugewiesenen Materialverhaltens - Parametrisierung für das in Abschnitt 2.5.3.2 wiedergegebene finite Viskoelastizitätsmodell nach Hartmann [2003]

K N/mm ²	c_{10} N/mm ²	c_{01} N/mm ²	c_{30} N/mm ²	μ N/mm ²	η_0 N s/mm ²	s MPa ⁻¹
10^3	0.264	0.5	1.9×10^{-2}	0.2	180	10^{-3}

Darüber hinaus sei für die quasistatische verschiebungsgesteuerte Berechnung die Annahme eines ebenen Verzerrungszustands zu Grunde gelegt. Ähnliche Problemstellungen werden u. a. auch in den Arbeiten von Yang et al. [2005], Fischer und Wriggers [2005], Hartmann und Ramm [2008], Popp et al. [2009] und Gitterle et al. [2010] behandelt.

Die räumliche Diskretisierung der Kontinua $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$, siehe Abb. 6.75b, erfolgt mit 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad8). Insgesamt setzt sich die gewählte Gebietszerlegung aus $n^e = n^{e(1)} + n^{e(2)} = 1462$ Elementen, $n^n = n^{n(1)} + n^{n(2)} = 4332$ Knoten und $n_{\text{ua}} = n_{\text{ua}}^{e(1)} + n_{\text{ua}}^{e(2)} = 8664$ Verschiebungsfreiheitsgraden ($n_{\text{uu}} = 8356$, $n_{\text{up}} = 308$) zusammen. Des Weiteren wird zur Nachbildung der Kontaktspannungen im Interface der in Abschnitt 5.5.4.2 beschriebene duale Interpolationsansatz für das Lagrange-Multiplikatorfeld verwendet.

⁴³Die nichtlinearen Lastpfadverläufe für $\bar{u}_x(t)$ und $\bar{u}_y(t)$ wurden hinsichtlich der Initiierung eines glatten Eindring- und Walkvorgangs gewählt. In vielen Veröffentlichungen, siehe z. B. [Yang et al., 2005; Fischer und Wriggers, 2005; Hartmann und Ramm, 2008; Popp et al., 2009; Gitterle et al., 2010], wird jedoch der zweidimensionale Eindruckversuch mit Hilfe einer linearen stückweise stetigen Verschiebungssteuerung modelliert, vgl. auch Abb. 6.71b. Hierbei zeicheten sich im Rahmen der durchzuführenden Ordnungsanalysen erhebliche Probleme in Bezug auf die temporalen Konvergenzordnungen der analysierten Zeitintegrationsverfahren ab, sodass daraufhin auf die Anwendung solch einer Verschiebungssteuerung absichtlich verzichtet wurde. In diesem Zusammenhang sei auch erwähnt, dass im Bereich der quasistatischen Strukturmechanik bei Applikation nichtlinearer Dirichlet-Randbedingungen (Verschiebungsrandbedingungen) für DIRK-Verfahren bislang keine Reduktionen der temporalen Konvergenzordnungen nachgewiesen werden konnten. Im Rahmen dieses Kontextes stellen daher die Funktionen $\bar{u}_x(t)$ und $\bar{u}_y(t)$ eine zulässige Variante einer Verschiebungssteuerung dar.

Ausgangspunkt für die durchzuführenden temporalen Konvergenzstudien bildet eine hochgenaue numerische Referenzlösung mit dem Alexander/Cash Verfahren (Alex3/Cash) und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 5 \times 10^{-6}$ s. Durch Ausblenden von dynamischen Effekten in der Simulation wird das Konvergenzverhalten nur in Bezug auf die in Tab. D.1 spezifizierten DIRK-Verfahren analysiert. Die konstanten Zeitschrittweiten stammen aus dem limitierten Satz

$$\Delta t_n = \{10^{-3} \text{ s}, 5 \times 10^{-4} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-4} \text{ s}, 10^{-4} \text{ s}, 5 \times 10^{-5} \text{ s}, 2.5 \times 10^{-5} \text{ s}, 10^{-5} \text{ s}\}.$$

Reibungsloser Umformprozess Im Rahmen der folgenden Ausführungen wird zunächst eine reibungslose Kontaktmodellierung betrachtet. Für die dieser Problemdefinition zugrunde liegende Referenzlösung zeigen die Abb. 6.76 und 6.77 die Entwicklung der

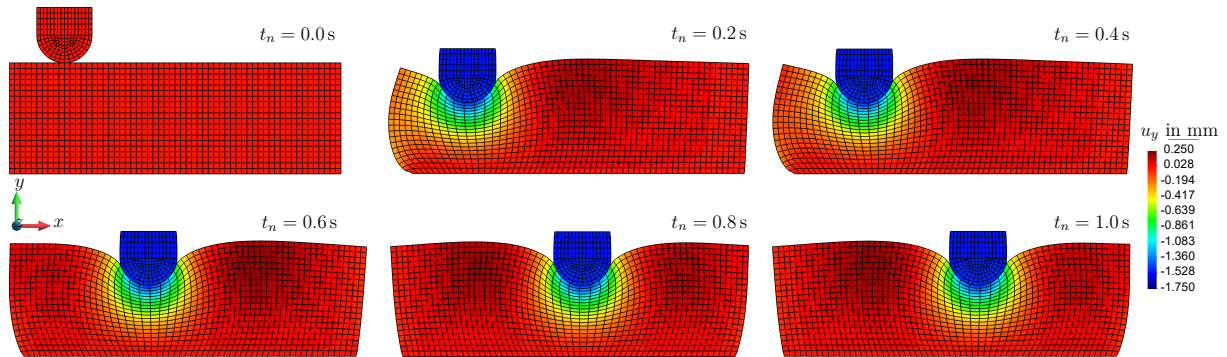


Abbildung 6.76: Zweidimensionaler Eindruckversuch ohne Reibung - Darstellung des Verschiebungsfeldes in y -Richtung für die Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 5 \times 10^{-6}$ s)

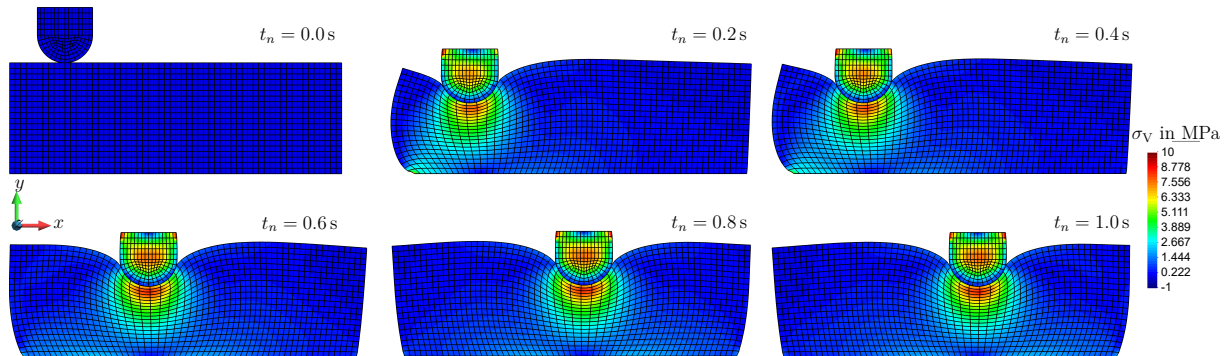
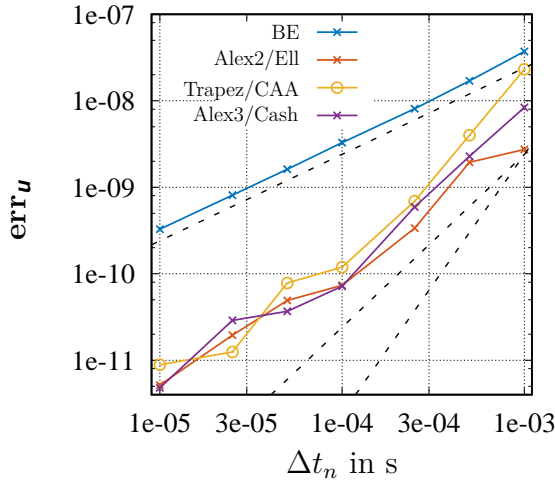
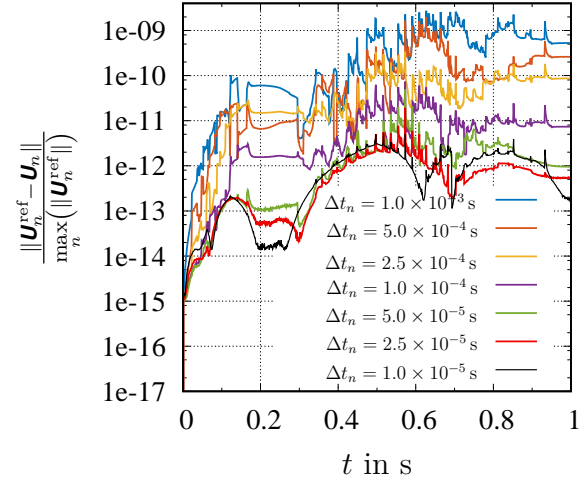


Abbildung 6.77: Zweidimensionaler Eindruckversuch ohne Reibung - Darstellung der von Mises Spannungsverteilung, für die Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 5 \times 10^{-6}$ s)

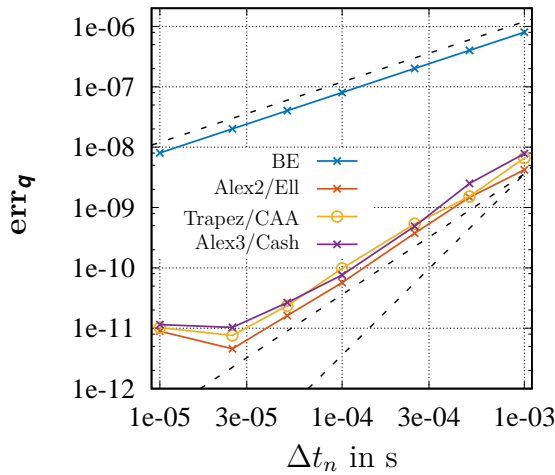
Strukturantwort in Gestalt der auf den deformierten Konfigurationen der Körper aufgetragenen von Mises Spannungsverteilung und dem Verschiebungsfeld in y -Richtung zu den Zeitpunkten $t = 0 \text{ s}$, $t = 0.2 \text{ s}$, $t = 0.4 \text{ s}$, $t = 0.6 \text{ s}$, $t = 0.8 \text{ s}$ und $t = 1 \text{ s}$.



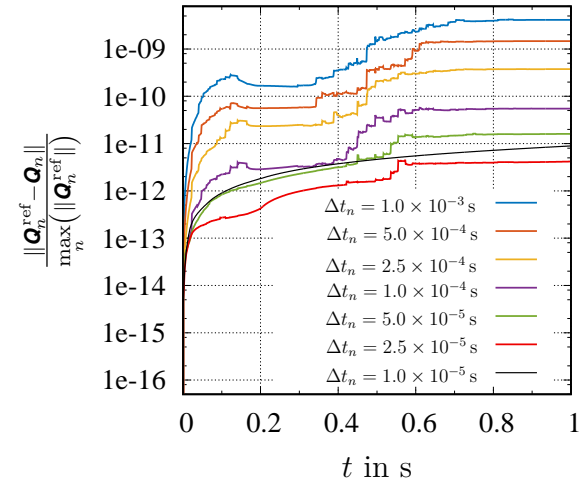
(a) Globaler Fehler der Verschiebungen



(b) Zeitlicher Verlauf des relativen Zeitintegrationsfehlers in den Verschiebungen, ausgewertet mit dem Alex2/Ell-Verfahren



(c) Globaler Fehler der inneren Variablen



(d) Zeitlicher Verlauf des relativen Zeitintegrationsfehlers in den inneren Variablen, ausgewertet mit dem Alex2/Ell-Verfahren

Abbildung 6.78: Ordnungsdiagramme für den zweidimensionalen Eindruckversuch ohne Reibung - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n ; Zeitlicher Verlauf der relativen Fehler in den Verschiebungen und den inneren Variablen, berechnet auf Basis des Alex2/Ell-Integrators und verschiedenen Herabstufungen der konstanten Zeitschrittweite Δt_n

Die Auswertungen der Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q , siehe Definitionen (6.1)₁ und (6.2)₂, sind in den Abb. 6.78a und 6.78c über der Zeitschrittweite Δt_n grafisch veranschaulicht. Zusammengefasst geht aus der Analyse der Ergebnisse der Ordnungsuntersuchung hervor, dass auch für dieses zweidimensionale Kontaktszenario ohne Reibung die Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung, d. h. das Verfahren zweiter Ordnung nach Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell, $p = 2$), die Trapezregel (Trapez/CAA, $p = 2$) und das Verfahren dritter Ordnung nach Alexander/Cash (Alex3/Cash, $p = 3$), hinter den theoretischen Erwartungen zurückbleiben. So ergeben sich exemplarisch für den Zeitintegrationsfehler im Verschiebungsfeld, siehe Abb 6.78a, lediglich die gemittelten Konsistenzordnungen $p_{\text{Alex2/Ell}} \approx 1.3621$, $p_{\text{Trapez/CAA}} \approx 1.7083$, und $p_{\text{Alex3/Cash}} \approx 1.6213$. Werden die Betrachtungen auf die Fehleranalyse zu den inneren Variablen, d. h. auf Abb. 6.78c, beschränkt, zeichnet sich ein positiveres Gesamtbild ab. Bis auf den Alex3/Cash-Integrator erreichen sämtliche Verfahren ihre theoretische Konvergenzordnung. Ersterer erfährt eine Ordnungsreduktion zu $p_{\text{Alex3/Cash}} \approx 2$, vgl. auch Abschnitt 6.3.1. Um einen detaillierten Einblick für die Bemessung der Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q zu erhalten, sei exemplarisch für das Alex2/Ell-Verfahren der relative Fehler in den Verschiebungen und den inneren Variablen grafisch über der Zeit in den Abb. 6.78b und 6.78d aufgetragen.⁴⁴ Aufgrund dieser Darstellungen wird offensichtlich, dass der maximale relative Zeitintegrationsfehler in den inneren Variablen am Ende des betrachteten Zeitintervalls für sämtliche untersuchten Zeitschrittweiten Δt_n auftritt. Bezugnehmend auf den Zeitintegrationsfehler im Verschiebungsfeld ist die Lokalisation nicht eindeutig und kann in erster Näherung nur grob in das Zeitintervall $0.4 \text{ s} \leq t \leq 0.8 \text{ s}$ eingeordnet werden. Darüber hinaus werden die Fehlerverläufe aus Abb. 6.78b durch ein massives Rauschen überlagert.

Neben dem Nachweis der Konvergenz ist hinsichtlich einer praktischen Anwendung der numerische Berechnungsaufwand in Bezug zu einer geforderten Präzision ein wesentlicher Punkt zur Bewertung der Verfahren. Die Abbildungen 6.79a und 6.79b zeigen den Zeitintegrationsfehler im Verschiebungsfeld und in den inneren Variablen aufgetragen über der benötigten Laufzeit des Programms. Zur Normalisierung der Programmlaufzeit in Abb. 6.79 wird die größte Ausführungszeit $t_{\text{ref}} = 13983.674 \text{ s}$ für eine Simulation mit dem Alex3/Cash-Verfahren und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 10^{-5} \text{ s}$ herangezogen. Prinzipiell lässt sich aus den Resultaten der Effizienzuntersuchungen ableiten, dass die DIRK-Verfahren höherer Ordnung dem impliziten Euler-Verfahren deutlich überlegen sind. Für eine vorgegebene Fehlerschranke benötigen sie eine geringere Programmlaufzeit. Weiterhin ist ersichtlich, dass sich der höhere numerische Aufwand für das Alex3/Cash-Verfahren nicht auszahlt. Im Vergleich zu den Verfahren, mit der theoretischen Konvergenzordnung $p = 2$, weist die Methode nach Alexander/Cash das schlechteste Aufwands-Genauigkeitsverhalten auf. Als Ursache hierfür ist die beobachtete Ordnungsreduktion in Kombination mit dem höheren numerischen Aufwand anzuführen.

Umformprozess mit Reibung Große Gleitbewegungen werden in der Realität durch Reibungsmechanismen begleitet. Zur Erweiterung der Untersuchungen soll daher im Folgenden in der Kontaktzone das reibungslose Tangentialkontaktgesetz durch das Cou-

⁴⁴Der in Abb. 6.78a gezeigte Konvergenzgraph des Alex2/Ell-Integrators folgt aus der Bestimmung des Maximums für jede einzelne zu einem konstanten Zeitschritt Δt_n in Abb. 6.78b aufgetragene Fehlerkurve.

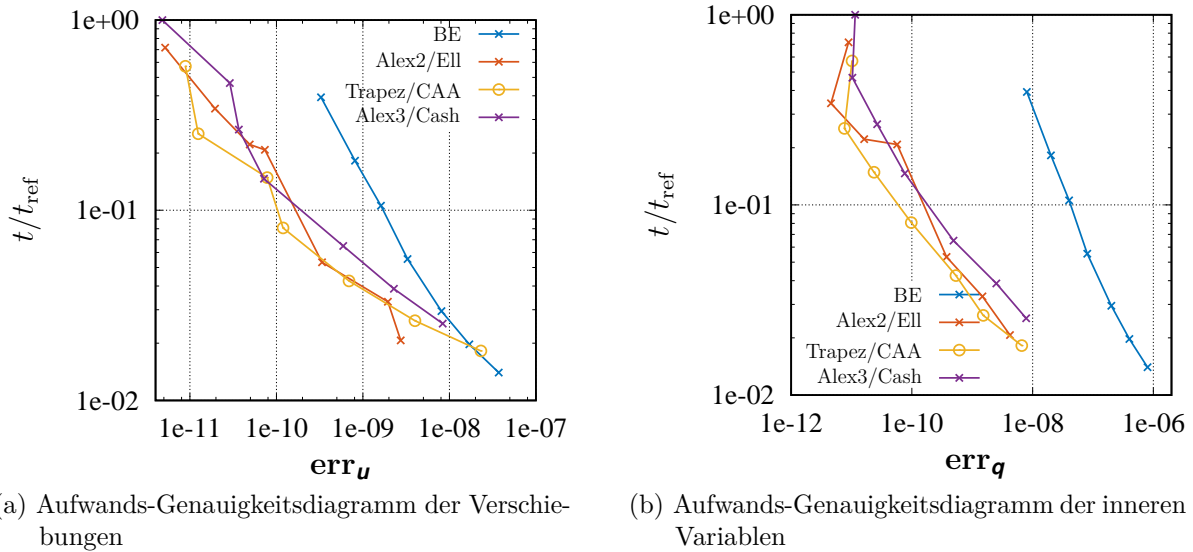


Abbildung 6.79: Aufwands-Genauigkeitsdiagramme für den zweidimensionalen Eindruckversuch ohne Reibung - Normalisierte Programmlaufzeit aufgetragen über globalen Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q

lombsche Reibgesetz ersetzt werden. Der Reibkoeffizient μ_c wird dabei zu $\mu_c = 0.2$ angenommen. Mit Ausnahme dieser Modifikation bleiben sämtliche Aussagen zur Definition des Berechnungsmodells und zur Diskretisierung jedoch unverändert bestehen. Konform zu den Ausführungen des vorherigen Paragraphen zeigen die Abb. 6.80 und 6.81 die Entwicklung der Strukturantwort der numerischen Referenzlösung in Gestalt der von Mises Spannungsverteilung und des Verschiebungsfeldes in y -Richtung als einen in der deformierten Konfiguration veranschaulichten Konturgraph. Aus den gezeigten Verformungszuständen wird klar, dass während des Eindruckvorganges, also für $t \leq 0.2$ s, die beiden Körper aneinander haften. Dieses Verhalten bleibt sogar bis zum Zeitpunkt $t \leq 0.4$ s bestehen, wobei bereits ab $t > 0.2$ s eine horizontale Verfahrbewegung des Umformwerkzeugs einsetzt. Nach Überschreiten der Haftgrenze zwischen 0.4 s $\leq t \leq 0.6$ s beginnen die beiden Körper aufeinander abzugleiten. Das Stadium der Gleitreibung ist erreicht. Die zugehörigen Ergebnisse der Ordnungsanalyse für das reibungsbehaftete Kontaktproblem sind in den Abb. 6.82a und 6.82c dargestellt. Aus der Gegenüberstellung von Abb. 6.82 mit Abb. 6.78 ist deutlich zu erkennen, dass sich das Konvergenzverhalten der Verfahren, insbesondere das der DIRK-Verfahren höherer Ordnung, für eine beinahe identische Problemstellung mit Reibung drastisch verändert. Mit Blick auf Abb. 6.82a erfahren sämtliche DIRK-Verfahren höherer Ordnung starke Ordnungsreduktionen, die sich in $p \approx 1$ manifestieren. Damit weist keiner der mehrstufigen DIRK-Integratoren eine höhere Ordnung als das implizite Euler-Verfahren auf. Darüber hinaus zeichnet sich das Konvergenzverhalten der Trapezregel durch eine signifikant vergrößerte Fehlerkonstante gegenüber dem implizitem Euler-Verfahren aus. Bei der Analyse des temporalen Konvergenzdiagramms für die inneren Variablen, siehe Abb. 6.82c, offenbaren sich sogar noch dramatischere Tendenzen. So ist festzuhalten, dass nur das implizite Euler-Verfahren

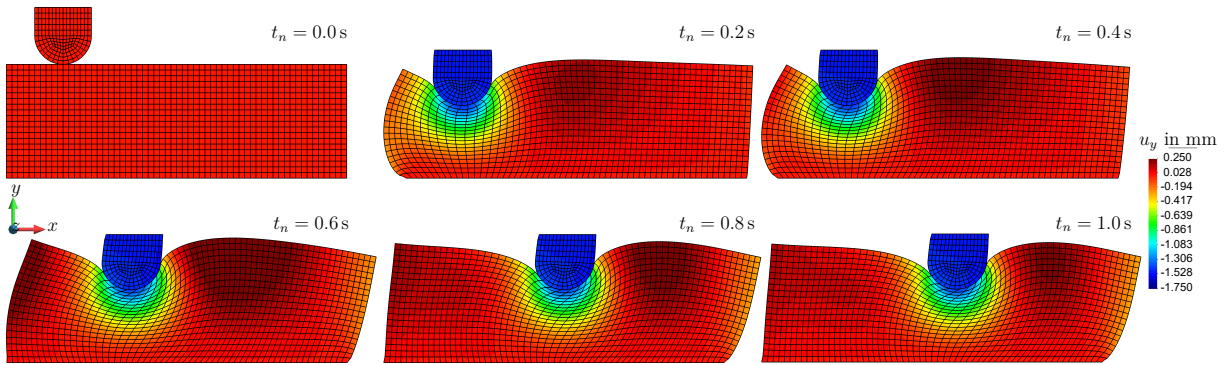


Abbildung 6.80: Zweidimensionaler Eindruckversuch mit Reibung - Darstellung des Verschiebungsfeldes in y -Richtung für die Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 5 \times 10^{-6}\text{ s}$)

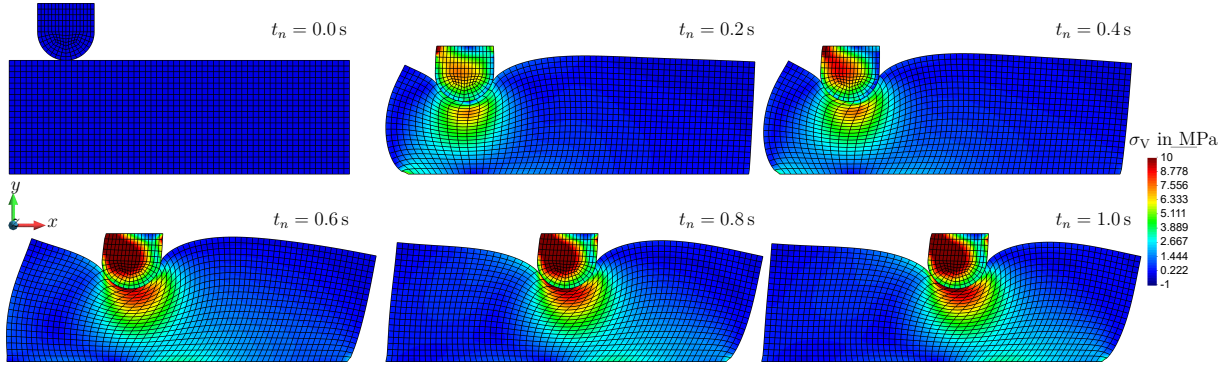
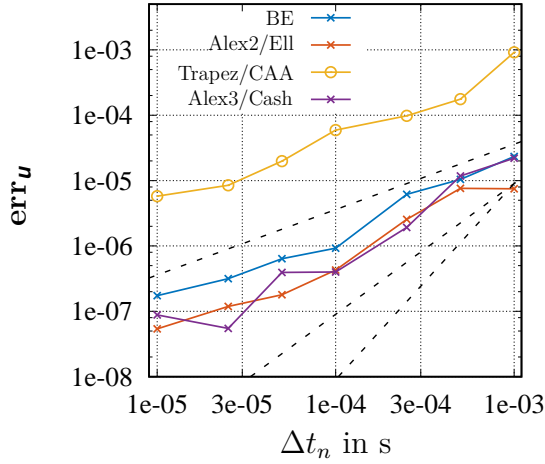


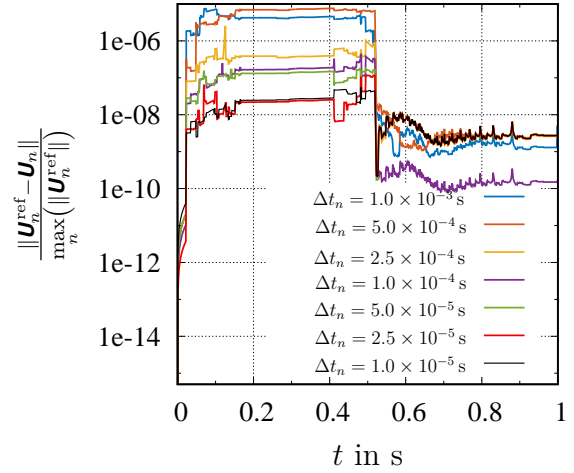
Abbildung 6.81: Zweidimensionaler Eindruckversuch mit Reibung - Darstellung der von Mises Spannungsverteilung, für die Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 5 \times 10^{-6}\text{ s}$)

und die Trapezregel konvergieren. Bei den beiden anderen DIRK-Integratoren muss die beobachtete Konvergenzcharakteristik als Divergenz eingestuft werden. Zur möglichen Ursachenforschung der absolut nicht mit der Theorie konformen Resultate sei der relative Fehler in den Verschiebungen und den inneren Variablen grafisch über Zeit in den Abb. 6.82b und 6.82d veranschaulicht. Aus Abb. 6.82b lässt sich ableiten, dass der maximale Zeitintegrationsfehler in den Verschiebungen nicht im Bereich des Gleitvorgangs, sondern in dem von Haftreibung dominierten Prozessbereich auftritt.⁴⁵ Der absinkende Sprung in den Fehlerverläufen bei $0.4\text{ s} \leq t \leq 0.6\text{ s}$ ist dem Beginn des Abgleitvorgangs zwischen dem Umformwerkzeug und dem Fundament zuzuordnen. Im Vergleich zu Abb. 6.82b kommen die zeitlichen Verläufe der relativen Fehler in den inneren Variablen aus Abb. 6.82d nahezu geglättet daher. Außerdem entsteht, wie schon beim kongruenten reibungslosen Kontaktproblem, siehe Abb. 6.78d des vorherigen Paragraphen, der maximale Zeitintegrationsfehler in den inneren Variablen für die meisten

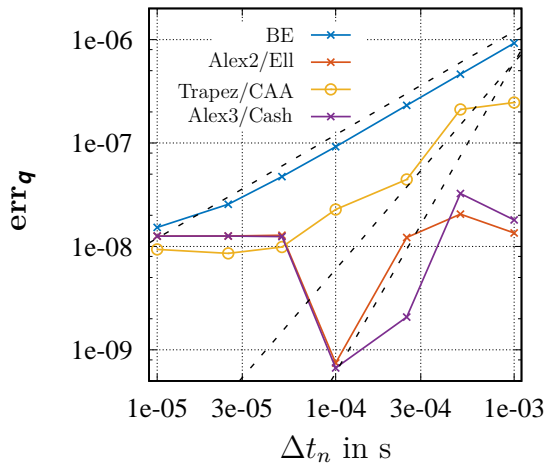
⁴⁵Obwohl die beiden Körper aneinander haften, wechseln lokal Kontaktpunkte vom Stadium der Haftreibung in den Gleitreibungszustand und umgekehrt. Das globale Verhalten ist allerdings durch Haftung charakterisiert.



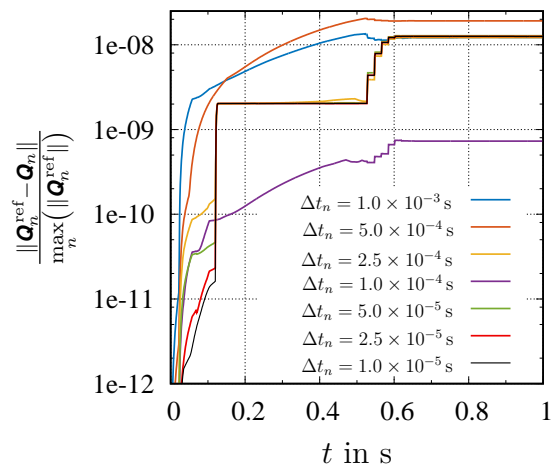
(a) Globaler Fehler der Verschiebungen



(b) Zeitlicher Verlauf des relativen Zeitintegrationsfehlers in den Verschiebungen, ausgewertet mit dem Alex2/Ell-Verfahren



(c) Zeitlicher Verlauf des relativen Zeitintegrationsfehlers in den inneren Variablen, ausgewertet mit dem Alex2/Ell-Verfahren



(d) Relativer Fehler für inneren Variablen am Beispiel von Alex2/Ell

Abbildung 6.82: Ordnungsdiagramme für den zweidimensionalen Eindruckversuch mit Reibung - Globale Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u und \mathbf{err}_q aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n ; Zeitlicher Verlauf der relativen Fehler in den Verschiebungen und den inneren Variablen, berechnet auf Basis des Alex2/Ell-Integrators und verschiedenen Herabstufungen der konstanten Zeitschrittweite Δt_n

Fehlerkurven am Ende des betrachteten Zeitintervalls. Weiterhin ist zu erkennen, dass in dem von Gleitreibung dominierten Prozessintervall der globale Fehler konstant bleibt.

Um einen direkten Vergleich zwischen der reibungslosen („no fric.“) und reibungsbehafteten („fric.“) Prozessführung zu ziehen, zeigt Abb. 6.83 die an der Oberseite des Werkzeugs auftretenden Reaktionskräfte in horizontaler und vertikaler Richtung. Während des Eindrückvorgangs steigt für beide betrachteten Prozessvarianten der Ab-

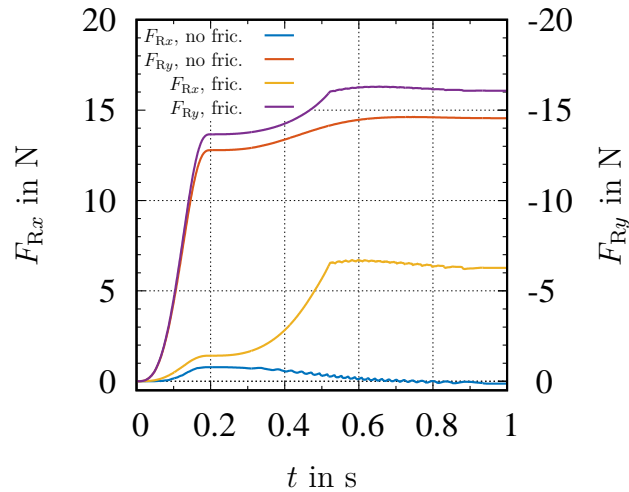


Abbildung 6.83: Gegenüberstellung der Reaktionskraftverläufe an der Oberseite des Umformwerkzeugs $\mathcal{B}^{h(1)}$ für die numerischen Referenzlösungen (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 5 \times 10^{-6}$ s) eines reibungslosen bzw. reibungsbehafteten Umformprozesses

solutbetrag der Lagerkraft in y -Richtung $|F_{Ry}|$ steil an. Hiernach erfolgen nur noch moderate Zuwächse bezüglich dieser Strukturreaktion. Infolge der Überlagerung des Normalkontakts mit den Reaktionskraftanteilen aus der Haft- bzw. Gleitreibung liegt der Lagerkraftverlauf für den reibungsbehafteten Umformprozess über der entsprechenden Kurve für das reibungslose Kontaktproblem. Während die beiden zuvor beschriebenen Kurven ähnlich zueinander verlaufen, lassen sich für die Strukturreaktion in x -Richtung größere Unterschiede identifizieren. So resultiert für eine Prozessführung ohne Reibung die Reaktionskraftkomponente in x -Richtung F_{Rx} primär aus dem Anpressvorgang des Werkzeugs an die rechte Flanke des deformierten Fundaments. Die reibungsbehaftete Strukturantwort folgt bis $t \leq 0.2$ s einer ähnlichen Entwicklung, wobei wie zuvor Kraftanteile aus Haft- bzw. Gleitreibung eine höhere Lagerkraft induzieren. Mit Beginn der horizontalen Verfahrbewegung des Umformwerkzeugs bewirkt in erster Linie die im Kontakt-Interface übertragene Haftkraft einen starken Anstieg von F_{Rx} . Nachdem die Haftgrenze überschritten wird und ein Abgleiten der beiden Kontaktkörper stattfindet, bleibt die Strukturreaktion in x -Richtung auf einem annähernd konstantem Niveau.

6.3.9 Dynamisches Kontaktproblem

Im folgenden Abschnitt wird ein hochdynamisches Kontaktproblem betrachtet. Wie zuvor stehen im Mittelpunkt der Untersuchungen Ordnungsanalysen im Zeitbereich für die

betrachteten Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung. Das analysierte Berechnungsmodell inklusive der applizierten Verschiebungs- und Druckrandbedingungen veranschaulicht Abb. 6.84. Im Rahmen der folgenden Berechnung soll ein Aufprall zwischen einer stähler-

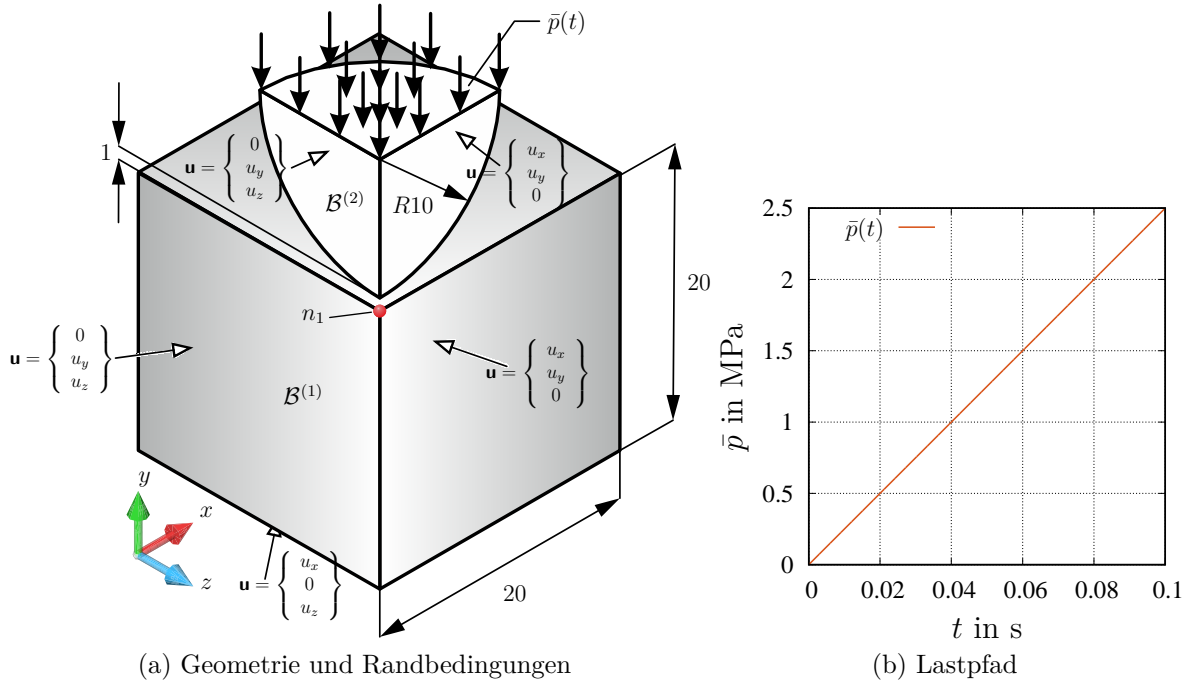


Abbildung 6.84: Problemdefinition der geometrisch nichtlinearen Aufprallsimulation

nen Kugel $\mathcal{B}^{(2)}$ und einem viskoelastischen Untergrund $\mathcal{B}^{(1)}$ nachempfunden werden. Die Kontaktinteraktion zwischen den Körpern $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$ verläuft reibungslos. Weiterhin wird dem durch die lineare Druckrandbedingung, siehe Abb. 6.84b, beschleunigten Körper $\mathcal{B}^{(2)}$ ein schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten, mit der in Tab. 6.15 angegebenen Parametrisierung, unterstellt. Für $\mathcal{B}^{(1)}$ findet erneut das ratenabhängige

Tabelle 6.15: Parametrisierung des der Stahlkugel $\mathcal{B}^{(2)}$ zugewiesenen Materialverhaltens - Parametrisierung für schwach-inkompressibles, hyperelastisches Konstitutivmodell, mit einer aus dem zweiten Ansatz von Tab. 2.5 und dem ersten Ansatz von Tab. 2.6 (Neo-Hooke-Typ) zusammengesetzten Formänderungsenergie

K	c_{10}
N/mm ²	N/mm ²
1.75×10^5	4.04×10^4

Konstitutivmodell der finiten Viskoelastizität aus Abschnitt 2.5.3.2 Anwendung. Die Parametrisierung des viskoelastischen Materialmodells fasst Tab. 6.16 zusammen.

Wegen der hohen Robustheit von Elementen mit linearer Interpolationsordnung in Bezug auf die in der vorliegenden Arbeit verfolgte mortar-basierte Kontaktdiskretisierungsstrategie mit dualen Formfunktionen zur Interpolation der Kontaktspannungen (Lagrange-

Tabelle 6.16: Parametrisierung des dem Fundament $\mathcal{B}^{(1)}$ zugewiesenen Materialverhaltens - Parametrisierung für das in Abschnitt 2.5.3.2 wiedergegebene finite Viskoelastizitätsmodell nach Hartmann [2003]

K N/mm ²	c_{10} N/mm ²	c_{01} N/mm ²	c_{30} N/mm ²	μ N/mm ²	η_0 N s/mm ²	s MPa ⁻¹
10^3	0.264	0.5	1.9×10^{-2}	0.2	180	10^{-3}

Multiplikatoren) werden zur Diskretisierung des Kontakt-Interface Viereckselemente mit linearen Ansatzfunktionen gewählt. Dies impliziert an die Volumendiskretisierung die Verwendung von 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8). Um außerdem das Auftreten von Locking-Effekten infolge des nahezu-inkompressiblen Materialverhaltens von $\mathcal{B}^{(1)}$ zu vermeiden, werden anstatt reinen verschiebungsbezogenen Elementen gemischte Elemente vom Q1P0-Typ zur Diskretisierung der Kontinua $\mathcal{B}^{(1)}$ und $\mathcal{B}^{(2)}$ herangezogen. Die Vernetzung ist durch die Diskretisierungsparameter $n^e = 12\,510$, $n^n = 14\,035$, $n_{ua} = 42\,105$, $n_{uu} = 40\,138$ und $n_{up} = 1967$ festgelegt.

Die Basis für die durchzuführende temporale Konvergenzstudie bildet eine hochgenaue numerische Referenzlösung mit dem Alexander/Cash Verfahren (Alex3/Cash) und einem Zeitschritt $\Delta t_n = 5.0 \times 10^{-6}$ s. Die Resultate der zum letzten Zeitschritt für $t = 1$ s ausgewerteten Strukturantwort der Referenzlösung zeigen die Abb. 6.85a und 6.85b. Die Verläufe der Zeitintegrationsfehler \mathbf{err}_u , \mathbf{err}_v und \mathbf{err}_q , siehe Definitionen (6.1)₁,

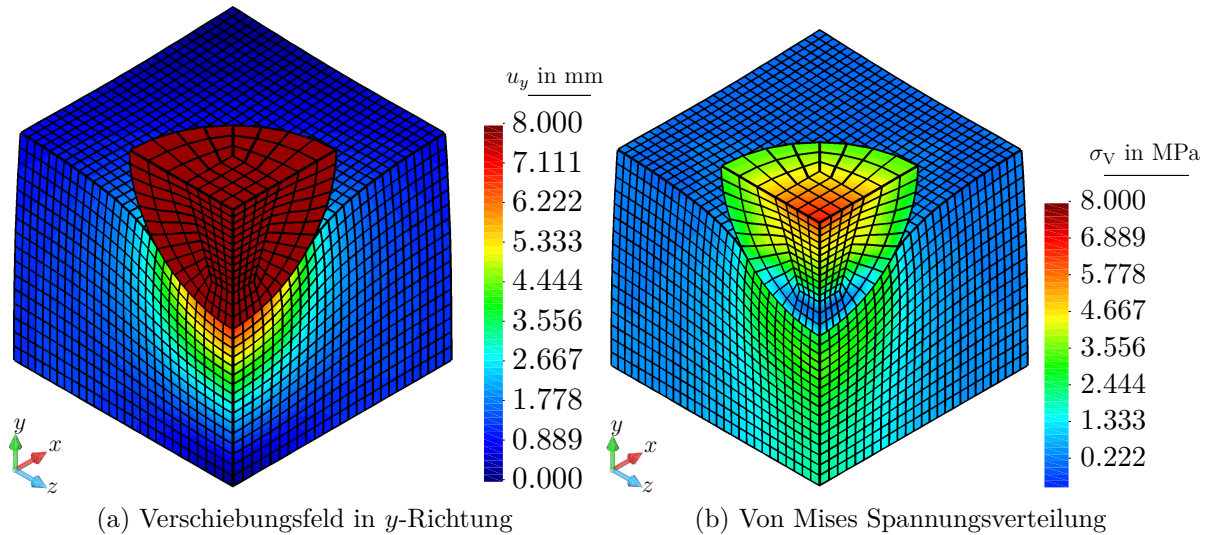
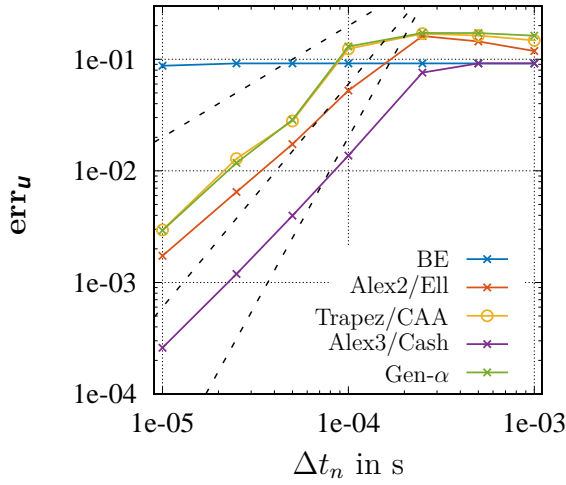
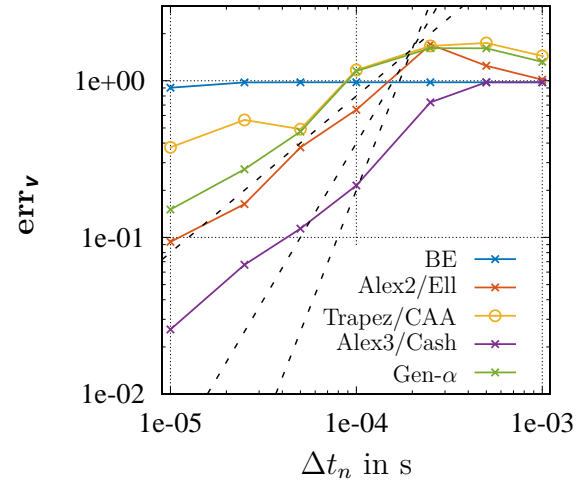


Abbildung 6.85: Dynamische Kollisionsberechnung - Darstellung des Verschiebungsfeldes in y -Richtung und der von Mises Spannungsverteilung für die Referenzlösung (Alex3/Cash, $\Delta t_n = 5.0 \times 10^{-6}$ s) zum Zeitpunkt $t = 0.1$ s

(6.1)₂ und (6.2)₂, sind in den Abb. 6.86a, 6.86b und 6.87a über der Zeitschrittweite Δt_n grafisch visualisiert. Es zeigt sich deutlich, dass im Rahmen des betrachteten dreidimensionalen Aufprallproblems die beobachteten Konsistenzordnungen der Verfahren

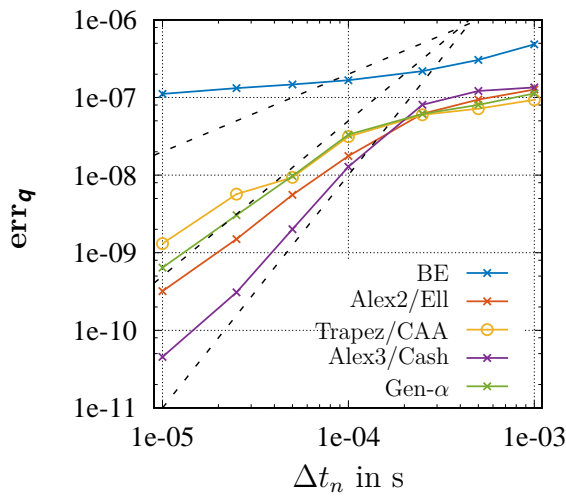


(a) Globaler Fehler der Verschiebungen

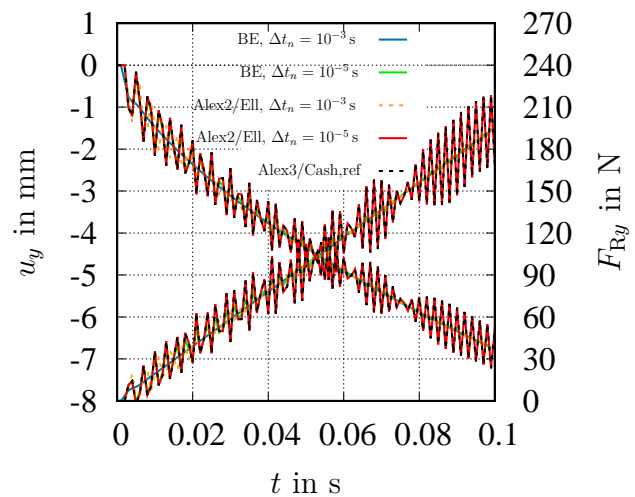


(b) Globaler Fehler der Geschwindigkeiten

Abbildung 6.86: Ordnungsdiagramme für dynamische Kollisionsberechnung - Globale Zeitintegrationsfehler err_u und err_v , aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n



(a) Globaler Fehler der inneren Variablen



(b) Reaktionskraft- und Verschiebungskomponente in y -Richtung, ausgewertet am Knoten n_1

Abbildung 6.87: Ordnungsdiagramm für dynamische Kollisionsberechnung - Globaler Zeitintegrationsfehler err_q , aufgetragen über der Zeitschrittweite Δt_n ; Auswertung der Reaktionskraft und Verschiebung in y -Richtung am Knoten n_1

in Bezug auf das Verschiebungs- und Geschwindigkeitsfeld deutlich von den theoretisch realisierbaren Konvergenzordnungen abweichen und sich um den Wert $p = 1$ anschmiegen. Hinsichtlich des Fehlerverhaltens für die inneren Variablen lassen sich für die Integratoren höherer Ordnung nahezu mit der Theorie konforme Resultate erzielen. Lediglich das Verfahren nach Alexander/Cash (Alex3/Cash) weist geringe Abweichungen von der theoretischen Ordnung $p = 3$ auf. Weiterhin geht aus der Betrachtung der Abb. 6.86a, 6.86b und 6.87a hervor, dass das implizite Euler-Verfahren (BE) eine sehr schlechte Leistung in Bezug auf das zugeordnete zeitliche Konvergenzverhalten offenbart. So sind für den Zeitdiskretisierungsfehler in den Verschiebungen und den Geschwindigkeiten nahezu keine Reduktionen mit kleiner werdenden Zeitschrittweite identifizierbar. Aus diesem Blickwinkel betrachtet, erscheint eine Zeitdiskretisierung mit Verfahren höherer Ordnung, trotz der beobachteten Ordnungsreduktionen, an Attraktivität zu gewinnen.

Um die Ursachen für das beobachtete Konvergenzverhalten näher zu beleuchten, zeigt Abb. 6.87b die am Punkt (Knoten) n_1 , siehe Abb. 6.84a, ausgewertete Verschiebungs- und Reaktionskraftkomponente in y -Richtung, u_y (Kurvenverläufe von links oben nach rechts unten) und F_{Ry} (Kurvenverläufe von links unten nach rechts oben), für einige ausgewählte Berechnungen. Die durch den Einschlag hervorgerufenen Oszillationen sind ein Indikator für ein stark ausgeprägtes transientes Schwingungsverhalten in dem viskoelastischen Körper $\mathcal{B}^{(1)}$. Weiterhin ist zu erkennen, dass diese Oszillationen für das implizite Euler-Verfahren (BE) sehr schnell herausgedämpft werden. Selbst nach einer hundertfachen Absenkung des Zeitinkrements Δt_n ist am Ende des betrachteten Zeitintervalls von der punktuell ausgewerteten transienten Schwingungsantwort nur ein quasistatischer Anteil übrig. Als Ursache hierfür ist die dominante algorithmische Dämpfung des BE-Integrators anzuführen, die sämtliche hochfrequente Anteile der Schwingungsantwort in wenigen Zeitinkrementen auslöscht. Allerdings zeigt auch das Verfahren nach Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell) entsprechende algorithmische Dämpfungscharakteristiken, jedoch weniger ausgeprägt als das implizite Euler-Verfahren. Nach Absenken des Zeitschritts von $\Delta t_n = 10^{-3}$ s auf $\Delta t_n = 10^{-5}$ s gelingt es, die transiente Schwingungsantwort bis ans Ende des Zeitintervalls zu übertragen. Auf Grundlage dieser Analyse wird angenommen, dass der numerisch bedingte und inhärent in den Verfahren verankerte Dämpfungsmechanismus maßgeblich das beobachtete Konvergenzverhalten der Verfahren verschuldet.

6.3.10 Umformprozess eines viskoplastischen I-Profiles

Wie schon mehrfach in den vorherigen Abschnitten angemerkt, kann eine beachtliche Effizienzsteigerung der Zeitintegration mittels der in Abschnitt 5.2.5 vorgestellten adaptiven Schrittweitensteuerung erzielt werden. Vor allem bei Prozessen mit unterschiedlichen Zeitskalen bzw. sich verändernden Lösungsverhalten erweist sich die zeitadaptive Prozedur als essentiell, siehe z. B. [Rothe et al., 2012]. Zur Veranschaulichung des prinzipiellen Verhaltens der Schrittweitensteuerung im Kontext der Behandlung von Kontaktproblemen wird im Folgenden das in Abb. 6.88a gezeigte Berechnungsmodell betrachtet. Dieses setzt sich aus einem linksseitig fest eingespannten Kragarm $\mathcal{B}^{(1)}$, dessen Querschnitt einem vereinfachten I-Profil entspricht, und einem zylinderförmigen Umformwerkzeug $\mathcal{B}^{(2)}$ zusammen. Aufgrund der an den beiden seitlichen Stirnflächen des Zylinders $\mathcal{B}^{(2)}$

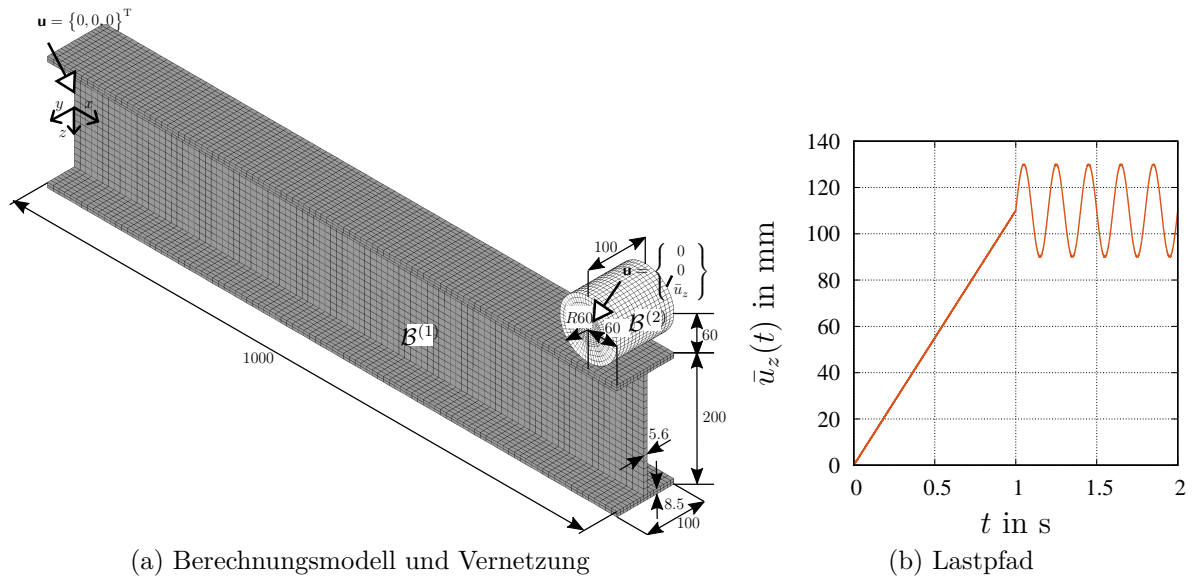


Abbildung 6.88: Problemdefinition des geometrisch nichtlinearen Umformprozesses zwischen einem viskoplastischen I-Profil und einem steifen elastischen Werkzeug (Zylinder)

aufgebrachten Verschiebungsrandbedingung

$$\bar{u}_z(t) = \begin{cases} \hat{K}t, & 0 \leq t < 1 \text{ s} \\ \hat{K}t_i + \hat{u}_z \sin(2\pi ft), & 1 \leq t \leq 2 \text{ s} \end{cases},$$

mit $\hat{K} = 1.1 \times 10^2 \text{ mm s}^{-1}$, $t_i = 1 \text{ s}$, $\hat{u}_z = 20 \text{ mm}$ und $f = 5 \text{ Hz}$, siehe auch Abb. 6.88b, ereignen sich im Zeitintervall $t \in [0 \text{ s}, 2 \text{ s}]$ mehrere Kollisionen zwischen den materiellen Körpern. Nach Herstellen des Initialkontakts innerhalb $0 \text{ s} \leq t < 1 \text{ s}$ sorgt die applizierte zyklische Beanspruchung im darauffolgenden Lastintervall $1 \text{ s} \leq t \leq 2 \text{ s}$ für ein wiederholtes Öffnen und Schließen des Kontakts. Der Prozess wird als quasistatisch und reibungslos modelliert. Die Abbildung des Werkstoffverhaltens des Trägers $\mathcal{B}^{(1)}$ in Gestalt eines hochlegierten Stahls erfolgt mit Hilfe des in Abschnitt 2.5.3.3 vorgestellten Materialmodells der finiten Viskoplastizität. Die verwendete Parametrisierung des Konstitutivmodells fasst Tab. 6.17 zusammen. Demgegenüber wird für das zylinderförmige

Tabelle 6.17: Parametrisierung des dem Kragträger $\mathcal{B}^{(1)}$ zugewiesenen Materialverhaltens - Parametrisierung für das in Abschnitt 2.5.3.3 wiedergegebene Materialmodell der finiten Viskoplastizität nach Quint [2007]

K MPa	G MPa	\hat{k} MPa	c_1 MPa	c_2 MPa	β 1/MPa	η —	σ_0 MPa	m —
166 666	76 900	200	6667	2×10^4	2.5×10^{-3}	0.1	1	1

Umformwerkzeug $\mathcal{B}^{(2)}$ ein schwach-inkompressibles, hyperelastisches Materialverhalten

vom Neo-Hooke-Typ, mit dem Kompressionsmodul $K = 1.75 \times 10^5 \text{ N mm}^{-2}$ und dem charakteristischen Neo-Hooke-Parameter $c_{10} = 4.0385 \times 10^4 \text{ N mm}^{-2}$, gewählt.⁴⁶ Weiterhin zeigt Abb. 6.88a die mittels 8-knotigen linearen Hexaeder-Elementen (Hex8) generierte räumliche Diskretisierung des Berechnungsmodells, mit der $n^e = n^{e(1)} + n^{e(2)} = 15\,280$ Elemente, $n^n = n^{n(1)} + n^{n(2)} = 21\,526$ Knoten, $n_{\text{ua}} = n_{\text{ua}}^{e(1)} + n_{\text{ua}}^{e(2)} = 64\,578$ Verschiebungsfreiheitsgrade und $n_Q = n_Q^{e(1)} + n_Q^{e(2)} = 1\,466\,880$ innere Variablen assoziierbar sind. Die mortar-basierte Kontaktdiskretisierungsstrategie verwendet zur Interpolation der Lagrange-Multiplikator im Kontakt-Interface duale Ansatzfunktionen.

Entsprechend dem in Abschnitt 5.2.5 vorgestellten Konzept der adaptiven Schrittweitensteuerung wird zur Abschätzung des lokalen Integrationsfehlers des aktuellen Zeitschritts das eingebettete Verfahren nach Alexander/Ellsiepen (Alex2/Ell) herangezogen. Auf Basis dieser Information lässt sich der Lösungsprozess mit einer geeigneten neuen Schrittweite, welche durch den PI-Schrittweitenregler aus Abschnitt 5.2.5 selektiert wird, fortsetzen. Zur Festlegung vorgegebener Fehlerschranken in den Lösungsvariablen werden die in Tab. 6.18 angegebenen absoluten und relativen Fehlertoleranzen verwendet. Die übrige Spezifikation des PI-Schrittweitenreglers, siehe Gl. (5.199), ist durch die

Tabelle 6.18: Absolute und relative Fehlertoleranzen der adaptiven Schrittweitenkontrolle

ε_a^u	ε_r^u	ε_a^q	ε_r^q
mm	—	—	—
10^{-3}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}

Kontrollparameter $f_{\text{safety}} = 0.85$, $f_{\text{min}} = 0.3$, $f_{\text{max}} = 2.5$ sowie die Verstärkungsfaktoren $\tilde{K}_I = 1/(\hat{p} + 1)$ und $\tilde{K}_P = 1/(\hat{p} + 1)$, die von der Konsistenzordnung des eingebetteten Verfahrens \hat{p} abhängen, definiert. Für das eingebettete DIRK-Verfahren nach Alexander/Ellsiepen gilt $\hat{p} = 1$. Am Beginn jedes Lastintervalls, d. h. für $t_n = t_0 = 0 \text{ s}$ und $t_n = 1 \text{ s}$, wird der Zeitintegrationsprozess mit einer Anfangsschrittweite $\Delta t_0 = 10^{-2} \text{ s}$ jeweils neu gestartet.

Zur Veranschaulichung der biegedominierten Strukturantwort zeigt Abb. 6.89 die von Mises Spannungsverteilung zum Zeitpunkt $t = 2 \text{ s}$, das sich für $t = 2 \text{ s}$ ausbildende Verschiebungsfeld sowie einen Konturgraph für die Fließfunktion f zum Zeitpunkt $t = 1 \text{ s}$. Letztere Feldgröße wird durch das dem Kragträger $\mathcal{B}^{(1)}$ zugewiesene viskoplastische Materialmodell motiviert und nimmt eine Unterscheidung von elastischen („elastic“) und plastischen („plastic“) Verhalten vor. Wie aus der Analyse der Abb. 6.89a und 6.89c hervorgeht, wird der Träger plastisch verformt und es verbleiben nach dem zyklischen Umformvorgang Eigenspannungen in dem Bauteil.⁴⁷ Mit Blick auf Abb. 6.89b lässt sich ableiten, dass am Ende des ersten Lastintervalls nahezu der gesamte Kragarm plastifiziert

⁴⁶Die zugehörige Formänderungsenergie setzt sich additiv aus dem zweiten Ansatz von Tab. 2.5 und dem ersten Ansatz von Tab. 2.6 (Neo-Hooke-Typ) zusammen.

⁴⁷Zum Abschluss des Umformvorgangs bei $t = 2 \text{ s}$ sind die beiden Kontaktkörper getrennt. Auf den Träger wirkt damit keine externe Belastung mehr.

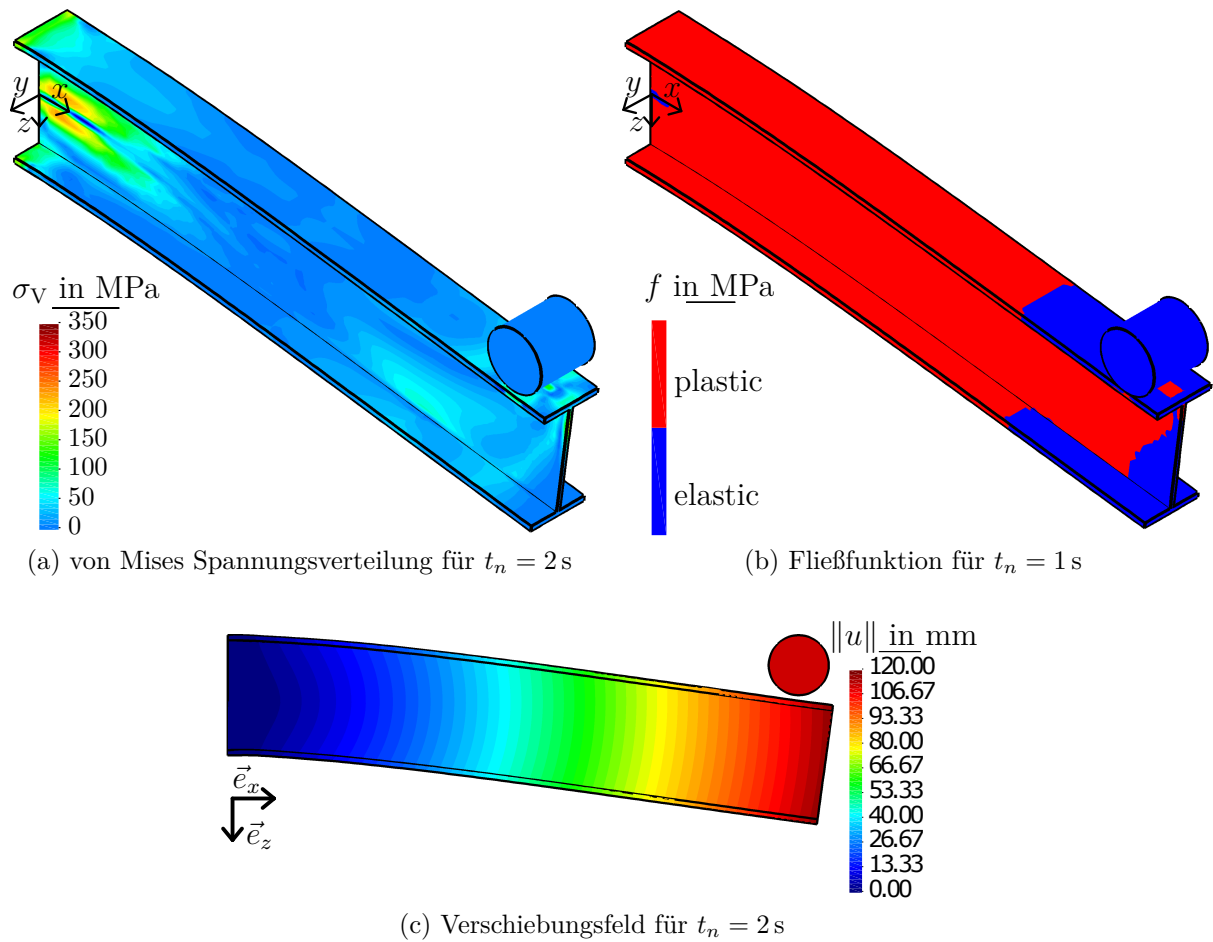


Abbildung 6.89: Umformprozess eines viskoplastischen I-Profiles - Darstellung der von Mises Spannungsverteilung zum Zeitpunkt $t = 2$ s, des plastisch-elastischen Fließkriteriums zum Zeitpunkt $t = 1$ s und des Verschiebungsfeldes zum Zeitpunkt $t = 2$ s für eine zeitadaptive Berechnung mit dem Alex2/Ell-Integrator

ist. Um den gesamten Umformprozess quantitativ zu erfassen, ist in Abb. 6.90a die an der linken Einspannung der balkenähnlichen Struktur auftretende Reaktionskraft \mathbf{F}_R über der Zeit t aufgetragen. Neben dem charakteristischen hystereseförmigen Verlauf der

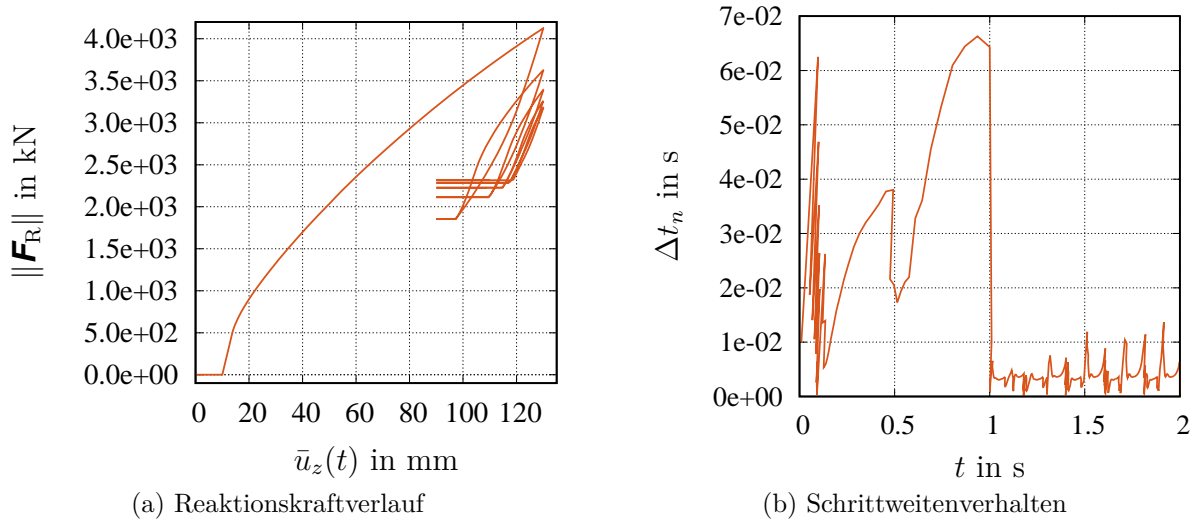


Abbildung 6.90: Umformprozess eines viskoplastischen I-Profiles - Darstellung der Reaktionskraft an der Einspannung des Kragträgers über der Zeit sowie Visualisierung des Schrittweitenverhaltens der adaptiven Schrittweitensteuerung für eine zeitadaptive Berechnung mit dem Alex2/Ell-Integrator

Reaktionskraft infolge der zyklisch aufgetragenen Verschiebungssteuerung offenbart sich eine entfestigende Strukturreaktion des Trägers, die durch eine Abnahme der Reaktionskraft an der Stelle der Maximalauslenkung $\max \bar{u}_z(t) = 130$ mm gekennzeichnet ist. Außerdem induziert der beobachtete Entfestigungsmechanismus eine Verringerung der Hystereseflächen innerhalb eines Zyklus, in dem sich Herstellen des Kontakts und Ablösen des Kontakts abwechseln. Aus der Zunahme der horizontal verlaufenden Teilstrecken des Reaktionskraftverlaufes ist weiterhin zu erkennen, dass mit jedem Zyklus die plastischen Deformationen anwachsen.

Abbildung 6.90b stellt die Entwicklung der Zeitschrittweiten Δt_n dar, die für den obigen Belastungsprozess, siehe Abb. 6.88b, durch die adaptive Schrittweitenkontrolle ermittelt wurden. In der ersten monoton ansteigenden Belastungsphase $0 \text{ s} \leq t < 1 \text{ s}$ schreitet die Lösung mit relativ großen Zeitschritten voran. Der zu beobachtende Einbruch in der Schrittweite Δt_n bei $t \approx 0.5 \text{ s}$ ist auf die Herstellung des Initialkontakts zwischen Werkzeug und Träger zurückzuführen. Nach Stabilisierung des Kontaktereignisses wächst das Zeitinkrement Δt_n wieder an. Zur Einhaltung der vorgegebenen Fehlertoleranzen, siehe Tab. 6.18, muss der Zeitschritt Δt_n in dem zweiten Lastintervall $1 \text{ s} \leq t \leq 2 \text{ s}$ signifikant abgesenkt werden. Die Kombination aus nichtlinearer Verschiebungssteuerung sowie alternierenden Kontaktzuständen verursacht hier relativ starke Oszillationen in der Schrittweitensequenz.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit liefert einen Beitrag zur Entwicklung effizienter numerischer Lösungsstrategien im Bereich der Finite-Elemente-Methode. Unter diesem Gesichtspunkt werden in dieser Monographie im Rahmen einer modernen konsistenten Raum- und Zeitdiskretisierung die numerische Simulation thermomechanisch gekoppelter transienter Strukturberechnungen in der Dynamik sowie von Interfacekopplungen, mit Bezug zu geometrisch nichtlinearen unilateralen Kontaktproblemen, unter Einbeziehung von Konstitutivmodellen vom Evolutionsgleichungstyp umgesetzt. So sind konkret Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung in Gestalt von steif-genauen diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) oder der Generalized- α Methode in Verbindung mit einem Mehrebenen-Newton-Verfahren auf die raumdiskretisierten Gleichungen, die als Resultat der Raumdiskretisierung mit der h-Version der Finite-Elemente-Methode hervorgehen, und auf die in einem gewöhnlichen Differentialgleichungssystem erster Ordnung zusammengefassten Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen, welche das inelastische Materialverhalten adäquat beschreiben, angewendet worden.

Den Einstieg in die vorliegende Arbeit bildet ein breites Spektrum an Grundlagen zur Kontinuumsmechanik sowie zur Kontaktmechanik. Nach Definition der starken Form für das betrachtete thermomechanisch gekoppelte Zweifeldproblem erfolgt der Übergang zu einer kongruenten Variationsformulierung. Eine analoge Vorgehensweise wird auf das strukturmechanische Anfangs-Randwertproblem mit Kontakt, den anderen in dieser Arbeit behandelten Themenkomplex, appliziert, wobei zur Berücksichtigung der Kontaktbedingungen (Kopplungsbedingungen) die Lagrange-Multiplikator-Methode Anwendung findet. Die als Interfacekopplungsgrößen eingeführten Lagrange-Multiplikatoren repräsentieren dabei physikalische Kontaktspannungen in der Kontaktfuge. Im Kontext einer durch die vertikale Linienmethode vorgegebenen Trennung von räumlicher und zeitlicher Diskretisierung wird die integrale Form des Anfangs-Randwertproblems in ein nichtlineares effektives Strukturgleichungssystem überführt und mit dem Mehrebenen-Newton-Verfahren gelöst.

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der impliziten Zeitintegration mit DIRK-Verfahren höherer Ordnung und der für dynamische Problemstellungen häufig eingesetzten Generalized- α Methode in Kombination mit inelastischen Materialverhalten, welches über Konstitutivmodelle vom Evolutionsgleichungstyp nachgebildet wird. Speziell der Einsatz dieser Zeitintegrationsverfahren auf Fragestellungen aus dem Bereich der Strukturdynamik sowie auf nicht glatte Fragestellungen aus dem Bereich der Kontaktmechanik stehen dabei im Mittelpunkt der durchgeführten Untersuchungen.

In Bezug auf Problemstellungen der Dynamik werden im Rahmen dieser Arbeit die Verfahrensvorschrift für das thermomechanisch gekoppelte Mehrfeldproblem hergeleitet und im Zuge der konsistenten Linearisierungsprozedur die resultierenden Residuum- und Funktionalmatrixausdrücke für die Elementformulierung erarbeitet. Besonderes Augen-

merk hierbei liegt auf der effizienten Implementierung der Algorithmen in das haus eigene Finite-Elemente-Programm *Tasafem*. Durch die Parallelisierung der globalen Lösungsroutinen, also der Routinen zum Aufbau des globalen Residuumsvektors und der globalen Funktionalmatrix, mit OpenMP-Konstrukten, wird die Effizienz weiter gesteigert. Die typischerweise spärlich besetzte globale Funktionalmatrix wird mit einem Speicherformat für dünn besetzte Matrizen beschrieben, was eine effiziente Behandlung der linearisierten Gleichungssysteme gestattet. Die Berechnung der linearen Gleichungssysteme erfolgt mit einem parallelisierten direkten Gleichungslöser für spärlich besetzte Matrizen. Zur Kontrolle der Genauigkeit und damit der Verlässlichkeit der numerischen Lösung sowie zur Reduktion des Berechnungsaufwands wird eine adaptive Zeitschrittweitensteuerung verwendet, die quasi keinen numerischen Mehraufwand verursacht. Die Komplexität eines Mehrfeldproblems erzwingt dabei jedoch geeignete Fehlernormen gesondert für die Lösungsvariablen zu wählen.

Als zweiter Themenkomplex dieser Arbeit wird eine stabile Modellierung von geometrisch nichtlinearen Kontaktvorgängen auf Grundlage der Mortar-Methode in die entwickelte globale Lösungsstrategie eingebettet. Der Grundidee der Mortar-Methode folgend wurden hierfür die Kontaktbedingungen, wie z. B. die Nichtdurchdringungsbedingung, in einem schwachen integralen Sinne formuliert. Als Basis für die Erarbeitung einer mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie mit dualen Ansatzfunktionen zur Interpolation der Interfacekopplungsgrößen (Lagrange-Multiplikatoren) dienen die Arbeiten von Popp et al. [2009], Popp et al. [2010], Gitterle et al. [2010], Popp [2012], Popp et al. [2012], Gitterle [2012], Popp et al. [2013], Popp und Wall [2014], Farah et al. [2015] und Farah et al. [2017]. Umfangreiche Erläuterungen zur Methodik geben detaillierte Einblicke in Bezug auf die technische Realisierung. Auch die Einbettung der mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie im Rahmen einer impliziten Zeitintegration sowie die zugehörige konsistente Linearisierungsprozedur werden in aller Ausführlichkeit diskutiert. Ein wesentliches Merkmal der vorgestellten Kontaktformulierung ist die Verwendung der von Wohlmuth [2000] vorgeschlagenen dualen Ansatzräume zur Interpolation der Kontaktspannungen im Interface. Im Gegensatz zur Interpolation des Lagrange-Multiplikatorfeldes mit klassischen Ansatzfunktionen können so die diskreten Kopplungsvariablen durch eine statische Kondensationsoperation aus dem zu lösenden linearisierten Gleichungssystem eliminiert werden. Damit bleibt die Größe des abschließend zu lösenden inkrementellen Strukturgleichungssystems konstant und wird einzig und allein durch die Dimension des unbekannten Verschiebungsfreiheitsgradvektors festgelegt. Obwohl sich im Rahmen finiter Deformationsprozesse die Anzahl aktiver Kontaktknoten ständig verändert, erwies sich die in das iterative Lösungsschema des Mehrebenen-Newton-Verfahrens eingebettete Aktive-Mengen-Strategie als sehr robust und effizient. Mathematisch motiviert, wird die in der vorliegenden Arbeit verwendete Aktive-Mengen-Strategie durch den Einsatz von nichtlinearen Komplementaritätsfunktionen, welche die semidiskreten Kontaktbedingungen in Ungleichungsform ersetzen. Erst nach Anwendung einer Zeitdiskretisierung und der hieran anknüpfenden konsistenten Linearisierungsprozedur resultieren aus den zeitdiskretisierten und linearisierten Kontaktbedingungen konkrete Aktualisierungsvorschriften für den aktiven bzw. inaktiven Kontaktknotensatz. Damit gestattet der halbglatte Multi-level-Newton-Algorithmus in einem einzigen Newton-Raphson-Verfahren auf globaler Ebene alle Nichtlinearitäten, resultierend aus der Geometrie, dem Material und der

Kontaktinteraktion, aufzulösen. Infolge dieser modernen DAE-Interpretation wird die zur Behandlung von Kontaktproblemen in Kombination mit inelastischen Materialverhalten vom Evolutionsgleichungstyp zum Einsatz kommende Lösungsstrategie in der vorliegenden Arbeit erstmalig bewusst mit einem halbglattem bzw. „semi-smooth“ Multilevel-Newton-Algorithmus in Verbindung gebracht.

Die dargelegte Vorgehensweise wird hinsichtlich ihrer Effizienz und des Fehlerverhaltens anhand einer umfangreichen Auswahl von numerischen Beispielen untersucht. Ausgehend von grundlegenden Untersuchungen im Bereich der Strukturmechanik, wobei hier Kontakt keine Berücksichtigung findet, wird die Komplexität in der Modellierung sukzessive gesteigert. Die Berechnung des dynamischen thermomechanisch gekoppelten Zweifeldproblems stellt die hier höchste betrachtete Komplexitätsstufe dar. Neben zahlreichen Beispielen zur Code-Verifikation wird detailliert das Fehlerverhalten im Zeitbereich von ausgewählten DIRK-Verfahren oder der Generalized- α Methode analysiert. So ist festzuhalten, dass das temporale Konvergenz- und Fehlerverhalten der untersuchten Zeitintegrationsverfahren in Bezug auf dynamische Problemstellungen im Vergleich zu kongruenten quasistatischen Problemen, siehe z. B. [Rothe et al., 2012; Netz, 2013; Hamkar, 2013], tendenziell schlechter ausfällt. Dennoch liefern die betrachteten Integratoren höherer Ordnung im Vergleich zu Verfahren niedriger Ordnung, wie z. B. dem impliziten Euler-Verfahren, auch im Bereich der Strukturmechanik erheblich präzisere Vorhersagen. Die Applikation einer automatischen Schrittweitenkontrolle auf Basis von eingebetteten Verfahren ist auch im Bereich der Dynamik ein probates Mittel um genaue Ergebnisse zu erzielen und den globalen Zeitintegrationsfehler zu beschränken.

Mit Blick auf die Anwendung der globalen Lösungsstrategie auf Kontaktprobleme wird zunächst zur Verifikation der mortar-basierten Kontaktdiskretisierungsstrategie gezeigt, dass der implementierte Algorithmus die in der einschlägigen Fachliteratur anerkannten Kontakt-Patch-Tests besteht. Auch das räumliche Konvergenzverhalten der Kontaktformulierung wird an einem konkreten Fallbeispiel numerisch überprüft und erzielt dabei die von der Theorie zur Mortar-Methode vorgegebenen optimalen räumlichen Konvergenzraten. Das Nachrechnen der Hertzischen Pressung offenbart ebenfalls sehr gute Übereinstimmungen zwischen der numerischen und analytischen Lösung. Hiernach wurden die Untersuchungen zum temporalen Fehlerverhalten der betrachteten Zeitintegrationsverfahren auch auf nicht glatte Kontaktprobleme ausgeweitet. Dabei wurden bereits bei der Analyse von zwei- und dreidimensionalen reibungslosen Kontaktvorgängen für die Integratoren höherer Ordnung erhebliche Einbußen im Konvergenzverhalten, in Gestalt der Konvergenzordnung p , festgestellt. Vergleichbar zu Problemstellungen aus dem Bereich der Plastizität, siehe z. B. [Ellsiepen und Hartmann, 2001; Hartmann und Bier, 2008], wird auf Basis dieser numerischen Beobachtungen die Aussage getroffen, dass temporale Konvergenzordnungen im Zeitbereich für nicht glatte Kontaktprobleme durch eine obere Schranke $p \leq 2$ limitiert sind. Auch ein reibungsbehaftetes Kontaktproblem, modelliert mittels Coulombschen Reibmodell wurde untersucht. Im Rahmen solcher Problemstellungen scheint die Regularität im Zeitbereich noch weiter eingeschränkt zu sein, sodass die Vorteile im Konvergenzverhalten von Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung nicht mehr existent sind. Eine Abschätzung des lokalen Integrationsfehlers durch eingebettete Verfahren muss daher sehr kritisch hinterfragt werden. In Bezug auf die Applikation einer automatischen Schrittweitenkontrolle wurde daher nur ein

reibungsloser Umformprozess simuliert. Die hierfür generierten Schrittweitensequenzen zeigen jedoch, dass die Kontrolle des lokalen Integrationsfehlers bei der Behandlung von relativ glatten Interfaceproblemen gelingt und so die Entscheidung über die korrekt gewählte Schrittweite in Verbindung mit einer vorgegebenen Fehlertoleranz dem Nutzer abgenommen werden kann.

Die vorliegende Arbeit stellt im Rahmen einer modernen Raum- und Zeitdiskretisierung einen wissenschaftlichen Beitrag zur Konstruktion einer universellen robusten und effizienten Lösungsstrategie dar. Gleichfalls sind allerdings für eine abschließende Bewertung der vorgeschlagenen Strategien noch weitergehende Forschungsarbeiten notwendig. Ein anzuführender Nachteil bei der Zeitdiskretisierung mit DIRK-Verfahren ist, dass sie im Bereich der Strukturmechanik bezogen auf ein konservatives mechanisches System nicht energie- und impulserhaltend arbeiten. Denkbar sind daher, wie von Kuhl und Ramm [1996] und Kuhl [1996] für die Generalized- α Methode vorgeschlagen, innerhalb eines Zeitschritts die Einbeziehung von zusätzlichen algebraischen Nebenbedingungen zur Erzwingung von Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung, wobei das DIRK-Verfahren nun den numerisch dissipativen Basisalgorithmus repräsentiert. Alternativ kann auch ein Geometrie orientiertes Konzept der numerischen Zeitintegration, siehe z. B. [Shampine, 1999; Hairer et al., 2006; Hartmann et al., 2008a], die mit den DIRK-Verfahren oder der Generalized- α Methode berechneten numerischen Lösungen korrigieren. Hierzu werden die Energie- und Impulsabbildungen als nachgeschalteter Projektionsschritt einbezogen. Ein erster Einsatz solch einer Strategie wurde in der vorliegenden Arbeit bereits aufgezeigt. Darüber hinaus liegen vergleichbare Untersuchungen im Rahmen der Thermomechanik, wie sie bereits für thermodynamisch konsistente Integratoren, siehe z. B. Romero [2009], Romero [2010a], Romero [2010b], Krüger et al. [2011], Krüger [2012] und Krüger et al. [2016], durchgeführt wurden, für die DIRK-Verfahren bislang nicht vor. So wäre die Klärung der Frage, ob DIRK-Verfahren bei der Behandlung von irreversiblen Vorgängen in geschlossenen thermodynamischen Systemen entropieproduzierend arbeiten, ein weiterer Schritt, um die Robustheit und Genauigkeit von DIRK-Verfahren abzuklären. Wie außerdem von Armero und Petőcz, 1998; Laursen, 2003 für das klassische Newmark-Verfahren nachgewiesen wurde, können bestimmte Kontakt Ereignisse zu einem Verlust der energetischen Stabilität des Integrators führen. Dieser Aspekt sollte ebenfalls in Bezug auf die betrachteten DIRK-Verfahren näher analysiert werden.

Weiterhin empfiehlt es sich, den Einsatz einer Reihe von Beschleunigungstechniken innerhalb der globalen Lösungsstrategie im Rahmen der Behandlung von Kontaktproblemen zu prüfen. So wurde beispielsweise in [Hartmann et al., 2009a] eine lineare Extrapolation zur Abschätzung des Startvektors für die iterative DIRK/MLNA-Lösungsprozedur eingeführt, mit der es gelingt die Anzahl globaler Iterationen signifikant zu senken. Die Übertragung dieses Konzepts auf die Interfacekopplungsvariablen ist vielversprechend und sollte daher analysiert werden. Ebenso könnte die Anwendbarkeit eines Chord-Multilevel-Newton-Verfahren, welcher die globale Funktionalmatrix für einige aufeinander folgende Iterationen konstant lässt, analysiert werden, siehe auch [Quint, 2012]. Da dieses Vorgehen jedoch voraussichtlich kein konvergentes Verhalten für einen Aktiven-Mengen-Ansatz (PDASS) auf Basis nichtlinearer Komplementaritätsfunktionen liefert, ist über eine auf einem Fixpunktverfahren basierende PDASS, siehe hierzu z. B. [Hartmann, 2007; Hartmann et al., 2007; Hartmann und Ramm, 2008], im Zusammenhang mit dem Chord-

Multilevel-Newton-Verfahren nachzudenken. Auch der Einsatz von Rosenbrock-Verfahren, siehe z. B. [Hamkar, 2013], welche sämtliche nachteiligen Aspekte einer impliziten Finite-Elemente-Prozedur, wie lokale Iterationen auf Quadraturebene für inelastische Materialmodelle oder globale Gleichgewichtsiterationen, vermeiden, scheint im Rahmen einer PDASS auf Basis eines Fixpunktverfahrens umsetzbar zu sein.

A Mathematische Hilfsmittel

A.1 Kreuzprodukt in Matrixform

Das Kreuzprodukt zwischen zwei Vektoren

$$\mathbf{w} = \{w_1, w_2, w_3\}^T \in \mathbb{R}^3 \quad \text{und} \quad \mathbf{v} = \{v_1, v_2, v_3\}^T \in \mathbb{R}^3$$

definiert für den fixierten Spaltenvektor \mathbf{w} , den sogenannten axialen Vektor, eine lineare Abbildung, die einen Vektor \mathbf{v} auf $\mathbf{w} \times \mathbf{v}$ abbildet. Durch die Identifikation eines schiefssymmetrischen Matrixoperators

$$\mathbf{\Omega}(\mathbf{w}) = \begin{bmatrix} 0 & -w_3 & w_2 \\ w_3 & 0 & -w_1 \\ -w_2 & w_1 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \quad (\text{A.1})$$

kann das Kreuzprodukt in Matrixform ausgedrückt werden als

$$\mathbf{w} \times \mathbf{v} = \mathbf{\Omega}(\mathbf{w}) \mathbf{v}. \quad (\text{A.2})$$

A.2 Modulo-Operator

Die Funktion

$$\text{mod} : \mathbb{Z} \times \{\mathbb{Z} \setminus \{0\}\} \rightarrow \mathbb{Z}, \quad (i, j) \mapsto k = i \bmod j := i - j \text{ floor}(i/j) \quad (\text{A.3})$$

kennzeichnet die aus vielen Programmiersprachen bekannte mathematische Variante des Modulo-Operators, welcher aus dem Zahlenpaar (i, j) den ganzzahligen Rest $k \in \mathbb{Z}$ der Division $i \in \mathbb{Z}$ geteilt durch $j \in \{\mathbb{Z} \setminus \{0\}\}$ berechnet. Die zur Definition notwendige Abrundungsfunktion

$$\text{floor} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{Z}, \quad x \mapsto i = \text{floor}(x) := \max(\{i \in \mathbb{Z} \mid i \leq x\}) \quad (\text{A.4})$$

ordnet jedem reellen Argument $x \in \mathbb{R}$ die nächstliegende, nicht größere ganze Zahl $i \in \mathbb{Z}$ zu.

A.3 Konditionszahl

In der numerischen Mathematik wird durch den weitläufigen Begriff der Kondition die Abhängigkeit der Lösung eines Problems von der Störung der Eingangsdaten beschrieben. Bezugnehmend auf die Lösung von linearen Gleichungssystemen der Gestalt

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n, \quad (\text{A.5})$$

charakterisiert die Konditionszahl $\text{cond } \mathbf{A}$ der Matrix \mathbf{A} ein Maß für die Sensitivität mit der das quadratisch reguläre System (A.5) auf Rundungsfehler oder fehlerhafte Eingangsdaten in \mathbf{A} und die rechte Seite \mathbf{b} reagiert. Das Empfindlichkeitsmaß $\text{cond } \mathbf{A}$ ist dabei unabhängig von dem konkret zur Lösung von Gl. (A.5) herangezogenen numerischen Verfahren. Die Konditionszahl der Koeffizientenmatrix \mathbf{A} ist in allgemeiner Form definiert als

$$\text{cond } \mathbf{A} = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\| \geq 1, \quad (\text{A.6})$$

wobei prinzipiell zur Berechnung von $\|\mathbf{A}\|$ und $\|\mathbf{A}^{-1}\|$ eine beliebige Matrixnorm Anwendung finden kann. Um auf Basis von $\text{cond } \mathbf{A}$ jedoch beispielsweise gültige Abschätzungen für den relativen Fehler

$$\frac{\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq (\text{cond } \mathbf{A}) \frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|}, \quad (\text{A.7})$$

mit dem Residuumvektor $\mathbf{r} = \mathbf{A}\mathbf{x}^* - \mathbf{b}$, zwischen der berechneten Näherung \mathbf{x}^* und dem exakten Lösungsvektor \mathbf{x} aufzustellen, muss zu $\|\mathbf{A}\|$ eine verträgliche Vektornorm (kompatible Vektornorm) gewählt werden.¹ Eine zur Euklidischen Vektornorm $\|\mathbf{x}\| := \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \sqrt{\sum_{k=1}^n x_k^2}$, die ausschließlich in der vorliegenden Arbeit zur Berechnung eines skalaren Zahlenwerts für Vektoren Anwendung findet, compatible Matrixnorm stellt die Frobenius-Norm

$$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}\|_F := \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})} = \sqrt{\sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n a_{kl}^2} \quad (\text{A.8})$$

dar. Häufiger ist in der Vorschrift (A.7) zur Bestimmung von $\text{cond } \mathbf{A}$ allerdings die sogenannte Spektralnorm

$$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}\|_2 := \sqrt{\mu_{\max}}, \quad \mu_{\max} = \max_k \mu_k, \quad (\text{A.9})$$

anzutreffen, die als Grenznorm (natürliche Matrixnorm) zur Euklidischen Vektornorm eine scharfe Abschätzung (A.7) liefert, siehe [Schwarz und Köckler, 2011]. In Gl. (A.9) kennzeichnet μ_{\max} den maximalen reellen Eigenwert des Matrixprodukts $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ aus dem Satz $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n \geq 0$. Im Fall einer symmetrischen Matrix $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$, deren Eigenwerten $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ durch die Beziehung $\mu_k = \lambda_k^2$ mit den vorherigen Nullstellen des charakteristischen Polynoms μ_k , $k = 1, \dots, n$, verknüpft sind, gilt

$$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}\|_2 := |\lambda_{\max}|, \quad |\lambda_{\max}| = \max_k |\lambda_k|, \quad (\text{A.10})$$

sodass unter Berücksichtigung von $\|\mathbf{A}^{-1}\| = \|\mathbf{A}^{-1}\|_2 = 1/|\lambda_{\min}|$, $|\lambda_{\min}| = \min_k |\lambda_k|$, für Gl. (A.6) der Ausdruck

$$\text{cond } \mathbf{A} = |\lambda_{\max}|/|\lambda_{\min}| \quad (\text{A.11})$$

resultiert. Ein großes Verhältnis zwischen dem betragsgrößten und betragskleinsten Eigenwerts einer symmetrischen Matrix deutet also darauf hin, dass durch Rundungsfehler oder fehlerhafte Eingangsdaten große Störungen in den numerischen Ergebnissen zu erwarten

¹Eine Matrixnorm $\|\mathbf{A}\|$ heißt verträglich mit der Vektornorm $\|\mathbf{x}\|$, falls die Ungleichung gilt:
 $\|\mathbf{A}\mathbf{x}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\| \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \wedge \forall \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$

sind. So geben beispielsweise Schwarz und Köckler [2011] für $d \gg \gamma$ die Abschätzung $\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}\|/\|\mathbf{x}\| \leq 10^{\gamma-d+1}$ an, dass bei Lösung eines linearen Gleichungssystems, mit d -präziser Gleitkommaarithmetik und einer Konditionszahl $\text{cond } \mathbf{A} \approx 10^\gamma$ für die Systemmatrix \mathbf{A} , die infolge unvermeidlicher Eingangsfehlern in \mathbf{A} und \mathbf{b} generierte Näherung \mathbf{x}^* lediglich $d - \gamma - 1$ korrekte Dezimalstellen aufweist. Detailliertere Ausführungen zur Konditionszahl den hierauf basierenden Fehlerabschätzungen können beispielsweise [Schwarz und Köckler, 2011; Meister, 2015] entnommen werden.

B FEM-Raumdiskretisierung

Der nachfolgende Anhangabschnitt dient dazu, die im Hauptteil 5 ausgelassenen Details zur Raumdiskretisierung mittels der Finite-Elemente-Methode nachzureichen.

B.1 Elementformen und Ansatzfunktionen

Bei der Anwendung der Finite-Elemente-Methode ist die Festlegung des Elementtyps, also die Wahl der Gestalt des Referenzelements und der zugehörigen Ansatzfunktionen, ein essentieller Faktor, den es in Bezug auf die Qualität der Simulationsergebnisse, die Stabilität, das räumliche Konvergenzverhalten und den numerischen Aufwand zu beachten gilt. Abb. B.1 zeigt sämtliche in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommende Kontinuums- und Oberflächenelemente. Da in der einschlägigen Fachliteratur keine einheitliche Systematik für eine lokale Knotennummerierung der unterschiedlichen Elemente existiert, ist im Rahmen der Präzisierung von algorithmischen Details zur Raumdiskretisierung in den Abschnitten 5.1 und 5.5 stets von den in Abb. B.1 angegebenen lokalen Orientierungen für die natürlichen Koordinatensysteme und der sich hierauf stützenden Nummerierungssystematik für die lokalen Knoten $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$ auszugehen.

Infolge der aus den schwachen Formulierungen (4.32) und (4.39) bzw. (4.33) und (4.40) in Kap. 4 resultierenden reduzierten Stetigkeitsanforderungen an die Felder $\vec{u}(\vec{X}, t)$ und $\Theta(\vec{X}, t)$ ¹ müssen auch die Ansatzfunktionen $N_a(\xi)$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, zur Generierung der FE-Lösungen $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t)$ und $\Theta^h(\mathbf{x}^h, t)$ nur eine globale \mathcal{C}^0 -Stetigkeit² gewährleisten. Im Rahmen des isoparametrischen Elementkonzepts werden zumeist Lagrangesche Interpolationsfunktionen

$$L_a^{(n)} : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \quad L_a^{(n)}(\xi) = \prod_{\substack{b=1 \\ b \neq a}}^n \frac{(\xi - \xi_b)}{(\xi_a - \xi_b)}, \quad L_a^{(n)}(\xi_b) = \delta_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \xi_a = \xi_b \\ 0 & \text{falls } \xi_a \neq \xi_b \end{cases}, \quad (\text{B.1})$$

mit dem Polynomgrad $p = n - 1$, für die Formfunktionen eingesetzt. Für den Fall eindimensionaler Problemstellungen lauten die klassischen Ansatzfunktionen $N_a(\xi) =$

¹Auf dem betrachteten physikalischen Gebiet müssen die Lösungen der Variationsformulierungen lediglich die Anforderung der Stetigkeit, nicht jedoch der stetigen Differenzierbarkeit erfüllen. In Bezug auf eine Raumdiskretisierung mit finiten Elementen können daher, ohne die theoretischen Konvergenzeigenschaften des Verfahrens negativ zu beeinflussen die approximierten Lösungen $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t)$ und $\Theta^h(\mathbf{x}^h, t)$ Knicke an den Elementübergängen aufweisen. Falls jedoch das numerische Näherungsverfahren zum Aufstellen von $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t)$ und $\Theta^h(\mathbf{x}^h, t)$ die starke Form des Anfangs-Randwertproblems als Grundgerüst heranzieht, ist auch die Erfüllung der stetigen Differenzierbarkeitsanforderung von höchster Relevanz.

²Die Anforderung der \mathcal{C}^0 -Stetigkeit impliziert an die Ansatzfunktionen $N_a(\xi)$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, dass die Kontinuität dieser Funktionen in jedem Punkt auf den Übergängen zwischen benachbarten Elementen sichergestellt wird.

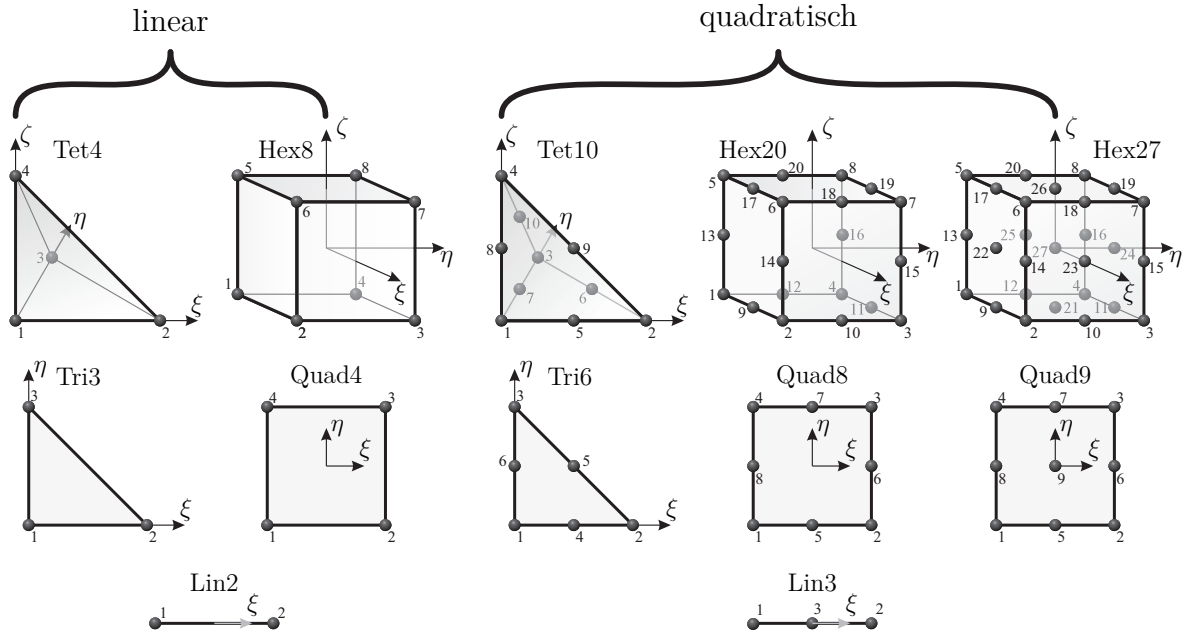


Abbildung B.1: Isoparametrische Kontinuums- und Oberflächenelemente mit linearen und quadratischen Ansatzfunktionen sowie zugehöriger lokaler Knotennummerierung; erste Bildreihe zeigt dreidimensionale Volumenelemente: 4-knotiges lineares Tetraeder-Element (Tet4), 8-knotiges lineares Hexaeder-Element (Hex8), 10-knotiges quadratisches Tetraeder-Element (Tet10), 20-knotiges quadratisches Hexaeder-Element (Hex20), 27-knotiges quadratisches Hexaeder-Element (Hex27); zweite Bildreihe zeigt dreidimensionale Oberflächenelemente bzw. zweidimensionale Kontinuumsselemente: 3-knotiges lineares Dreieck-Element (Tri3), 4-knotiges lineares Viereck-Element (Quad4), 6-knotiges quadratisches Dreieck-Element (Tri6), 8-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad8), 9-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad9); dritte Bildreihe zeigt: zweidimensionale Oberflächenelemente bzw. eindimensionale Stabelemente 2-knotiges lineares Linien-Element (Lin2), 3-knotiges quadratisches Linien-Element (Lin3).

$L_a^{(n_{\text{en}})}(\xi)$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, wobei die polynomiale Ordnung $p = n_{\text{en}} - 1$ nun durch die verwendete Knotenanzahl n_{en} festgelegt ist. Auf dem von drei bzw. vier Seiten im \mathbb{R}^2 ($n_{\text{dim}} = 2$, Tri- und Quad-Elemente) oder vier bzw. sechs Flächen im \mathbb{R}^3 ($n_{\text{dim}} = 3$, Tet- und Hex-Elemente) eingerahmten Gebiet des Referenzelements Ω_{\square} gehen fast alle Ansatzfunktionen $N_a(\xi)$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, aus einfachen Produktansätzen von Gl. (B.1) hervor. Darüber hinaus ist es hinsichtlich der Approximation des Verschiebungs- und Temperaturfeldes zwingend erforderlich, dass die elementbezogenen Formfunktionen zumindest in der Lage sind, ein vollständiges Polynom ersten Grades, d. h. $\hat{p} = 1$, auf Ω_{\square} nachzubilden.³ Dabei gilt naheliegender Weise der Zusammenhang: Desto größer der Grad p der verwendeten Lagrange-Polynome aus Gl. (B.1) ausfällt, um so höher ist der Grad des in den Ansatzfunktionen enthaltenen vollständigen Polynoms $\hat{p} \neq p$. Beispielsweise umfasst der biquadratische Polynomansatz für das 9-knotige Viereck-Element (Quad9)

$$N_a(\xi) = L_a^{(n_{\text{en}}^{\xi})}(\xi) L_a^{(n_{\text{en}}^{\eta})}(\eta), \quad n_{\text{en}}^{\xi} = n_{\text{en}}^{\eta} = 3, \quad n_{\text{en}} = n_{\text{en}}^{\xi} n_{\text{en}}^{\eta} = 9, \quad (\text{B.2})$$

sämtliche Glieder zur Definition eines vollständigen quadratischen Polynoms auf dem zweidimensionalen Referenzgebiet Ω_{\square} . Zusätzlich beinhaltet Gl. (B.2) allerdings auch die Polynomterme (Monome) höherer Ordnung $\xi^2\eta$, $\xi\eta^2$ und $\xi^2\eta^2$. Unter Ausnutzung der isoparametrischen Koordinatentransformation (5.11) überträgt sich für einfach berandete Elementregionen Ω^e bzw. ω^e , auf denen $\det \mathbf{J}^e = \text{const.}$ bzw. $\det \mathbf{j}^e = \text{const.}$ gilt, der Polynomgrad von $N_a(\xi)$ auf die mit der inversen Transformationsabbildung $\phi_{\mathbf{R}}^e = \chi_{\mathbf{R}}^e{}^{-1}$ bzw. $\phi_t^e = \chi_t^e{}^{-1}$ verkettete Funktionsdarstellung $N_a(\phi_{\mathbf{R}}^e(\mathbf{x}^h))$ bzw. $N_a(\phi_t^e(\mathbf{x}^h))$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$.⁴ In Verbindung mit der an den Elementübergängen postulierten Kontinuität ist der aus den globalen Ansatzfunktionen konstruierte endlichdimensionale Lösungsraum in der Lage auf geometrisch exakt approximierten Gebieten polynomiale Feldbeschreibungen vom Grad \hat{p} , z. B. eine analytische Verschiebungs- oder Temperaturlösung, präzise abzubilden. In Anlehnung an Popp [2012] soll diese Eigenschaft im Folgenden als globale Reproduktionsordnung \hat{r} bezeichnet werden, wobei für sämtliche in der vorliegenden Arbeit verwendeten Standardansatzfunktionen $\hat{r} = \hat{p}$ gilt. Neben der Spezifikation der polynomialen Komplettheit durch \hat{p} existiert zum Nachweis eines konvergenten Raumdiskretisierungsschemas im Rahmen des isoparametrischen Elementkonzepts das Kriterium der Vollständigkeit, siehe [Hughes, 2000, S. 109–120]. Dieses Merkmal stützt sich auf die plausible Tatsache, dass bei Netzverfeinerung die exakte Lösung und deren Ableitungen gegen konstante Werte im physikalischen Elementgebiet streben. Aus diesem Grund müssen die im Element errichteten Feldapproximationen (5.20) und (5.29) sämtliche durch die Koordinaten $x^h = \chi_{tx}^e(\xi)$, $y^h = \chi_{ty}^e(\xi)$ und $z^h = \chi_{tz}^e(\xi)$ ausgedrückten konstanten und linearen Monome enthalten. In Bezug auf rein mechanische Problemstellungen wird damit die Darstellbarkeit von Starrkörperbewegungen und konstanten Verzerrungszuständen sichergestellt. Exemplarisch anhand des skalaren Temperaturfeldes $\hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t)$, siehe Gl. (5.29), veranschaulicht, erfüllen $N_a(\xi)$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, das Kriterium

³Sind in den zu behandelnden Variationsformulierungen Ableitungen der Ordnung m involviert, müssen die Ansatzfunktionen vollständige Polynome m -ten Grades repräsentieren.

⁴Unter der Voraussetzung $\det \mathbf{J}^e = \text{const.}$ bzw. $\det \mathbf{j}^e = \text{const.}$ entsprechen die inversen Koordinatentransformationsabbildungen $\phi_{\mathbf{R}}^e = \chi_{\mathbf{R}}^e{}^{-1}$ und $\phi_t^e = \chi_t^e{}^{-1}$ nicht-rationalen Polynomfunktionen.

der Vollständigkeit, wenn die Knotentemperaturen

$$\Theta_a^e = C_0^\Theta(t) + C_1^\Theta(t)x_a^e + C_2^\Theta(t)y_a^e + C_3^\Theta(t)z_a^e, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}, \quad (\text{B.3})$$

die lineare Feldinterpolation

$$\hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t) = C_0^\Theta(t) + C_1^\Theta(t)x^h + C_2^\Theta(t)y^h + C_3^\Theta(t)z^h \quad (\text{B.4})$$

in ω^e für beliebige reelle Koeffizienten $C_0^\Theta(t) \in \mathbb{R}$, $C_1^\Theta(t) \in \mathbb{R}$, $C_2^\Theta(t) \in \mathbb{R}$ und $C_3^\Theta(t) \in \mathbb{R}$ induzieren. Um von Gl. (B.3) zu Gl. (B.4) zu gelangen, dient als Ausgangspunkt die Interpolationsvorschrift (5.29). Die Substitution von Gl. (B.3) in Gl. (5.29) liefert

$$\begin{aligned} \hat{\Theta}^e(\mathbf{x}^h, t) &= \mathbf{N}_\Theta^{\text{eT}}(\boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\Theta}^e(t) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a(\boldsymbol{\xi}) \Theta_a^e \\ &= \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a(\boldsymbol{\xi}) (C_0^\Theta(t) + C_1^\Theta(t)x_a^e + C_2^\Theta(t)y_a^e + C_3^\Theta(t)z_a^e) \\ &= C_0^\Theta \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a + C_1^\Theta \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a x_a^e + C_2^\Theta \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a y_a^e + C_3^\Theta \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a z_a^e \\ &= C_0^\Theta \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a + C_1^\Theta x^h + C_2^\Theta y^h + C_3^\Theta z^h. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Nach Ausnutzen der isoparametrischen Koordinatentransformation (5.11)₂ verbleibt für Gl. (B.5) lediglich die Prüfung des Ausdrucks

$$\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}} N_a(\boldsymbol{\xi}) = 1 \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in \Omega_\square. \quad (\text{B.6})$$

Es kann leicht gezeigt werden, dass sämtliche in der vorliegenden Arbeit verwendeten Standardansatzfunktionen $N_a(\boldsymbol{\xi})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, in jedem lokalen Punkt $\boldsymbol{\xi} \in \Omega_\square$ die Konsistenzbedingung (B.6) erfüllen und somit das Kriterium der Vollständigkeit gewährleisten. Obwohl im Kontext zum isoparametrischen Elementkonzept hinsichtlich der zu erzielenden Genauigkeit und Raumkonvergenzordnung eine möglichst hoher Polynomgrad wünschenswert ist, liegt jedoch in der vorliegenden Arbeit die Beschränkung auf die in der Praxis am weitesten verbreiteten konformen Elementtypen⁵ mit $\hat{p} \leq 2$.⁶ Für weiterführende Details zur Konstruktion der Standardansatzfunktionen $N_a(\boldsymbol{\xi})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, sowie zu deren charakteristischen Eigenschaften wird auf die exzellenten Darstellungen in [Hughes, 2000; Wriggers, 2008; Dhett et al., 2012; Zienkiewicz et al., 2013] verwiesen.

⁵Finite-Elemente-Diskretisierungen, bei denen in der Raumintegration der Funktionalmatrizen Ableitungen der Ordnung m involviert sind, werden als konform bzw. kompatibel bezeichnet, wenn die zugehörigen Ansatzfunktionen im Elementgebiet \mathcal{C}^m -stetig verlaufen und eine \mathcal{C}^{m-1} -Kontinuität entlang der Übergänge zwischen benachbarten Elementen aufweisen, siehe [Hughes, 2000, S. 109–110].

⁶Elementformulierungen auf Basis von Lagrange-Polynomansätzen mit $\hat{p} > 2$ neigen zu Oszillationen in den Lösungen. Außerdem sind sie vom Standpunkt des numerischen Aufwands unattraktiv, da der Besetzungsgrad der globalen Funktionalmatrizen zunimmt, womit sich der Aufwand zur Lösung der zugehörigen linearen Gleichungssysteme erhöht.

Eine vollständige Auflistung der in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden klassischen Formfunktionen ist Tab. B.1 zu entnehmen. In Bezug auf Tab. B.1 sei angemerkt, dass in den Gl. (B.10) und (B.11) die Größen $L_1 := \hat{L}_1(\xi, \eta)$, $L_2 := \hat{L}_2(\xi, \eta)$ und $L_3 := \hat{L}_3(\xi, \eta)$ baryzentrische Koordinaten für ein Dreieck (Dreieckskoordinaten) und in den Gl. (B.15) und (B.16) die Beziehungen $L_1 := \hat{L}_1(\xi, \eta, \zeta)$, $L_2 := \hat{L}_2(\xi, \eta, \zeta)$, $L_3 := \hat{L}_3(\xi, \eta, \zeta)$ und $L_4 := \hat{L}_4(\xi, \eta, \zeta)$ baryzentrische Koordinaten für ein Tetraeder symbolisieren. Die lokalen Knoten $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$ auf den Berandungen eines linienförmigen (Lin2, Lin3), quadratischen (Quad4, Quad8, Quad9) oder quaderförmigen (Hex8, Hex20, Hex27) Referenzgebiets Ω_{\square} befinden sich an den Positionen $\xi_a \in \mathcal{P}_{\square}$, $\eta_a \in \mathcal{P}_{\square}$ und $\zeta_a \in \mathcal{P}_{\square}$, mit $\mathcal{P}_{\square} = \{-1, 0, 1\}$, siehe hierzu auch Abb. B.1. Verständlicherweise reicht zur Spezifikation der Knotenposition für eindimensionale Elementformen (Lin2, Lin3) die Koordinatenkomponente ξ_a aus, während bei den in der ξ - η -Ebene ausgerichteten Referenzelementen (Tri3, Tri6, Quad4, Quad8, Quad9) das Koordinatenpaar $\xi_a = \{\xi_a, \eta_a\}^T$ und bei dreidimensionalen Elementformen (Tet4, Tet10, Hex8, Hex20, Hex27) das Tupel $\xi_a = \{\xi_a, \eta_a, \zeta_a\}^T$ verwendet werden. Die Aufnahme des diskreten Werts 0 in die Menge \mathcal{P}_{\square} ist nur für die Positionsangabe eines Mittelknoten, dessen Koordinatenkomponenten in mindestens einer der lokalen Koordinatenrichtungen den Wert 0 annehmen, relevant. Durch Ausrichtung des Koordinatenursprungs im ersten lokalen Knoten eines dreiseitigen bzw. vierflächigen Referenzelements (Tri3, Tri6, Tet4, Tet10) ist der für Ω_{\square} maßgebliche Bereich auf den Koordinatenachsen durch $0 \leq \xi \leq 1$, $0 \leq \eta \leq 1$ und $0 \leq \zeta \leq 1$ beschränkt. Aus der äquidistanten Verteilung der Knoten entlang der Seiten bzw. Kanten folgen die lokalen Knotenpositionierungen $\xi_a \in \mathcal{P}_{\square}$, $\eta_a \in \mathcal{P}_{\square}$ und $\zeta_a \in \mathcal{P}_{\square}$, mit $\mathcal{P}_{\square} = \{0, 1/2, 1\}$. Wie zuvor ist die Integration des mittleren diskreten Werts 1/2 in den Satz \mathcal{P}_{\square} nur bei quadratischen Elementtypen erforderlich. Außerdem ist das Koordinatenpaar $\xi_a = \{\xi_a, \eta_a\}^T$ zur Angabe der Knotenposition für die dreieckförmigen Referenzelemente (Tri3, Tri6) ausreichend. Eine grafische Illustration der Funktionsverläufe für ein- und zweidimensionale Formfunktionen wird in Abschnitt C.3 zusammen mit den dualen Interpolationsansätzen für das Lagrange-Multiplikatorfeld nachgereicht.

Höherwertige Elementformulierungen mit besseren Genauigkeits- und Konvergenzeigenschaften basieren im Vergleich zur dargestellten h-Version der Finite-Elemente-Methode (h-FEM) auf grundlegend verschiedenen Philosophien in Bezug auf die Raumdiskretisierung. So wird beispielsweise zur Verfeinerung in der p-Version der Finite-Elemente-Methode (p-FEM), siehe [Szabó und Babuška, 1991; Szabó et al., 2004], der Polynomgrad für die Elementansatzfunktionen erhöht, während die mit einer fixierten, zumeist sehr kleinen Anzahl an finiten Elementen diskretisierte Geometrie unangetastet bleibt.⁷ Hier-

⁷Die in dieser Arbeit behandelte h-Version der Finite-Elemente-Methode stellt in Kombination mit dem isoparametrischen Elementkonzept durch Netzverfeinerung die Annäherung an die exakte Lösung sowie die Approximation an eine fehlerfreie Beschreibung von gekrümmten Geometrien, wobei beide Annäherungen im Idealfall den Verlauf einer algebraischen Konvergenzcharakteristik aufweisen, sicher. Die Fixierung Netzes im Rahmen des p-FEM-Ansatzes schließt jedoch eine solche Vorgehensweise kategorisch aus. Dennoch ist es von größter Relevanz hinsichtlich der Erfüllung der optimal prognostizierten exponentiellen Konvergenzrate im Raum eine gekrümmte Berandung der Geometrie möglichst exakt wiederzugeben. Eine Alternative, die es erlaubt ein exaktes Abbild der geometrischen Struktur zu erzeugen, ist die sogenannte „blending function method“, siehe [Gordon und Hall, 1973a; Gordon und Hall, 1973b]. Diese Methodik basiert auf einer exakten Geometriebeschreibung der Oberflächen und Kanten durch beispielsweise rationale oder nicht-rationale B-Spline-Funktionen, welche wiederum zum

bei hat es sich als zweckmäßig erwiesen, hierarchische Ansatzfunktionen⁸ auf Basis von integrierten Legendre-Polynomen zu konstruieren. Für einen umfassenden Überblick zum p-FEM-Ansatz sei auf die Arbeit von Netz [2013] und die dort zitierte Literatur referiert.

Eine in jüngster Vergangenheit in der Pionierarbeit von Hughes et al. [2005] vorgestellte Raumdiskretisierungsstrategie verknüpft die isoparametrische Finite-Elemente-Methode mit NURBS-basierten CAD-Methoden. Dabei stellt die Geometrirepräsentation für ein CAD-Modell durch NURBS keine notwendige Voraussetzung dar. Prinzipiell sind auch beliebig andere sich parametrisierend lassende Flächen- und Kurvenbeschreibungen in das Konzept integrierbar. Diesem Sachverhalt trägt die Bezeichnung isogeometrische Analysis Rechnung. Im Rahmen des originalen Ansatzes wird eine spezielle Klasse von hierarchischen Ansatzfunktionen mit Hilfe von NURBS konstruiert. Die Übernahme des isoparametrischen Elementkonzepts führt auf die Verwendung identischer Polynomfunktionen für die Feld- und Geometrieinterpolationen. Die von vornherein gewährleistete fehlerfreie Beschreibung der Geometrie ist ein direktes Resultat der aus dem CAD-Programm übertragen Oberflächenbeschreibungen der Struktur. Ein weiterer wesentlicher Vorteil der isogeometrischen Analysis ist, dass auf einfache Art und Weise Verfeinerungen in der Vernetzung und im Polynomgrad der NURBS-Funktionen vorgenommen werden können, ohne die zugrunde liegende Geometrie zu verändern.

Tabelle B.1: \mathcal{C}^0 -stetige Ansatzfunktionen $N_a(\xi)$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, im Rahmen eines isoparametrischen Elementkonzepts, definiert im Gebiet des Referenzelements Ω_{\square}

lok. Knotennr. a	Ansatzfunktion $N_a(\xi)$	
2-knotiges lineares Linien-Element (Lin2, $n_{\text{en}} = 2$)		
$a = 1, 2$	$N_a(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi_a \xi)$	(B.7)
	$\Omega_{\square} = \{-1 \leq \xi \leq 1\}, \quad \xi \in \Omega_{\square}$	
3-knotiges quadratisches Linien-Element (Lin3, $n_{\text{en}} = 3$)		
$a = 1, 2$	$N_a(\xi) = \frac{1}{2}(\xi + \xi_a)\xi$	(B.8)
$a = 3$	$N_a(\xi) = 1 - \xi^2$	(B.9)
	$\Omega_{\square} = \{-1 \leq \xi \leq 1\}, \quad \xi \in \Omega_{\square}$	

Aufstellen der Koordinatentransformation im Element herangezogen werden.

⁸Hierarchische Ansatzfunktionen zeichnen sich durch die Eigenschaft aus, dass sämtliche Ansatzfunktionen mit dem niedrigeren Polynomgrad p in der Menge der Polynomfunktionen, mit dem Grad $p + 1$, enthalten sind.

Tabelle B.1: Fortsetzung: \mathcal{C}^0 -stetige Ansatzfunktionen im Rahmen eines isoparametrischen Elementkonzepts

lok. Knotennr. a	Ansatzfunktion $N_a(\boldsymbol{\xi})$
3-knotiges lineares Dreieck-Element (Tri3, $n_{\text{en}} = 3$)	
$a = 1, \dots, 3$	$ \begin{aligned} N_a(\boldsymbol{\xi}) &= \hat{L}_a(\xi, \eta), \quad \text{mit} \\ L_1 &:= \hat{L}_1(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta, \\ L_2 &:= \hat{L}_2(\xi, \eta) = \xi, \\ L_3 &:= \hat{L}_3(\xi, \eta) = \eta \\ \Omega_{\square} &= \{\xi \geq 0, \eta \geq 0, \xi + \eta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta\}^T \in \Omega_{\square} \end{aligned} $
6-knotiges quadratisches Dreieck-Element (Tri6, $n_{\text{en}} = 6$)	
$a = 1, \dots, 3$	$ \begin{aligned} N_a(\boldsymbol{\xi}) &= \hat{L}_a(\xi, \eta) (2\hat{L}_a(\xi, \eta) - 1), \quad \text{mit} \\ L_1 &:= \hat{L}_1(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta, \\ L_2 &:= \hat{L}_2(\xi, \eta) = \xi, \\ L_3 &:= \hat{L}_3(\xi, \eta) = \eta \end{aligned} $
$a = 4$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = 4\hat{L}_2(\xi, \eta)\hat{L}_1(\xi, \eta)$
$a = 5$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = 4\hat{L}_3(\xi, \eta)\hat{L}_2(\xi, \eta)$
$a = 6$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = 4\hat{L}_1(\xi, \eta)\hat{L}_3(\xi, \eta)$
	$\Omega_{\square} = \{\xi \geq 0, \eta \geq 0, \xi + \eta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta\}^T \in \Omega_{\square}$
4-knotiges lineares Viereck-Element (Quad4, $n_{\text{en}} = 4$)	
$a = 1, \dots, 4$	$ \begin{aligned} N_a(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{4}(1 + \xi_a \xi)(1 + \eta_a \eta) \\ \Omega_{\square} &= \{-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta\}^T \in \Omega_{\square} \end{aligned} $
9-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad9, $n_{\text{en}} = 9$)	
$a = 1, \dots, 4$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(\xi + \xi_a)(\eta + \eta_a)\xi\eta$
$a = 5, 7$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(\eta + \eta_a)\eta$
$a = 6, 8$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \eta^2)(\xi + \xi_a)\xi$
$a = 9$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)$
	$\Omega_{\square} = \{-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta\}^T \in \Omega_{\square}$
8-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad8, $n_{\text{en}} = 8$)	
$a = 1, \dots, 4$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(1 + \xi_a \xi)(1 + \eta_a \eta)(\xi_a \xi + \eta_a \eta - 1)$
$a = 5, 7$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(1 + \eta_a \eta)$
$a = 6, 8$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \eta^2)(1 + \xi_a \xi)$
	$\Omega_{\square} = \{-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta\}^T \in \Omega_{\square}$

Tabelle B.1: Fortsetzung: \mathcal{C}^0 -stetige Ansatzfunktionen im Rahmen eines isoparametrischen Elementkonzepts

lok. Knotennr. a	Ansatzfunktion $N_a(\boldsymbol{\xi})$
4-knotiges lineares Tetraeder-Element (Tet4, $n_{\text{en}} = 4$)	
$a = 1, \dots, 4$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \hat{L}_a(\xi, \eta, \zeta), \quad \text{mit}$ $L_1 := \hat{L}_1(\xi, \eta, \zeta) = 1 - \xi - \eta - \zeta,$ $L_2 := \hat{L}_2(\xi, \eta, \zeta) = \xi,$ $L_3 := \hat{L}_3(\xi, \eta, \zeta) = \eta,$ $L_4 := \hat{L}_4(\xi, \eta, \zeta) = \zeta$ $\Omega_{\square} = \{\xi \geq 0, \eta \geq 0, \zeta \geq 0, \xi + \eta + \zeta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta, \zeta\}^T \in \Omega_{\square}$
10-knotiges quadratisches Tetraeder-Element (Tet10, $n_{\text{en}} = 10$)	
$a = 1, \dots, 4$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \hat{L}_a(\xi, \eta, \zeta) (2\hat{L}_a(\xi, \eta, \zeta) - 1), \quad \text{mit}$ $L_1 := \hat{L}_1(\xi, \eta, \zeta) = 1 - \xi - \eta - \zeta,$ $L_2 := \hat{L}_2(\xi, \eta, \zeta) = \xi,$ $L_3 := \hat{L}_3(\xi, \eta, \zeta) = \eta,$ $L_4 := \hat{L}_4(\xi, \eta, \zeta) = \zeta$
$a = 5, \dots, 7$	$N_5(\boldsymbol{\xi}) = 4L_2L_1, \quad N_6(\boldsymbol{\xi}) = 4L_3L_2, \quad N_7(\boldsymbol{\xi}) = 4L_1L_3$
$a = 8, \dots, 10$	$N_8(\boldsymbol{\xi}) = 4L_4L_1, \quad N_9(\boldsymbol{\xi}) = 4L_4L_2, \quad N_{10}(\boldsymbol{\xi}) = 4L_4L_3$
	$\Omega_{\square} = \{\xi \geq 0, \eta \geq 0, \zeta \geq 0, \xi + \eta + \zeta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta, \zeta\}^T \in \Omega_{\square}$
8-knotiges lineares Hexaeder-Element (Hex8, $n_{\text{en}} = 8$)	
$a = 1, \dots, 8$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{8}(1 + \xi_a\xi)(1 + \eta_a\eta)(1 + \zeta_a\zeta) \quad (\text{B.17})$ $\Omega_{\square} = \{-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1, -1 \leq \zeta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta, \zeta\}^T \in \Omega_{\square}$
27-knotiges quadratisches Hexaeder-Element (Hex27, $n_{\text{en}} = 27$)	
$a = 1, \dots, 8$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{8}(\xi + \xi_a)(\eta + \eta_a)(\zeta + \zeta_a)\xi\eta\zeta$
$a = \{9, 11, 17, 19\}$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)(\eta + \eta_a)(\zeta + \zeta_a)\eta\zeta$
$a = \{10, 12, 18, 20\}$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(1 - \eta^2)(\xi + \xi_a)(\zeta + \zeta_a)\xi\zeta$
$a = \{13, 14, 15, 16\}$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(1 - \eta^2)(\xi + \xi_a)(\eta + \eta_a)\xi\eta$
$a = 21, 26$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(1 - \eta^2)(\zeta + \zeta_a)\zeta$
$a = 22, 24$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \zeta^2)(1 - \xi^2)(\eta + \eta_a)\eta$
$a = 23, 25$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}(1 - \eta^2)(1 - \zeta^2)(\xi + \xi_a)\xi$
$a = 27$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2)(1 - \zeta^2)$
	$\Omega_{\square} = \{-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1, -1 \leq \zeta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta, \zeta\}^T \in \Omega_{\square}$

Tabelle B.1: Fortsetzung: \mathcal{C}^0 -stetige Ansatzfunktionen im Rahmen eines isoparametrischen Elementkonzepts

lok. Knotennr. a	Ansatzfunktion $N_a(\boldsymbol{\xi})$
20-knotiges quadratisches Hexaeder-Element (Hex20, $n_{\text{en}} = 20$)	
$a = 1, \dots, 8$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{8}(1 + \xi_a \xi)(1 + \eta_a \eta)(1 + \zeta_a \zeta)(\xi_a \xi + \eta_a \eta + \zeta_a \zeta - 2)$
$a = \{9, 11, 17, 19\}$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)(1 + \eta_a \eta)(1 + \zeta_a \zeta)$
$a = \{10, 12, 18, 20\}$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(1 - \eta^2)(1 + \zeta_a \zeta)(1 + \xi_a \xi)$
$a = \{13, 14, 15, 16\}$	$N_a(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4}(1 - \zeta^2)(1 + \xi_a \xi)(1 + \eta_a \eta)$
$\Omega_{\square} = \{-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1, -1 \leq \zeta \leq 1\}, \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi, \eta, \zeta\}^T \in \Omega_{\square}$	

B.2 Numerische Integration

Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode wird ein Volumenintegral in der Referenzkonfiguration durch ein Integral über das diskretisierte Gebiet Ω^h und die Zerlegung in eine Summe von Teilintegralen über die Elementgebiete approximiert. Mit Hilfe des isoparametrischen Ansatzes und der damit induzierten Koordinatentransformation gelingt es, die Integration im Parameterraum Ω_{\square} auszuführen. Unter Annahme einer Diskretisierung mit Hexaeder-Elementen gilt

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \hat{f}(\mathbf{X}, t) dV &\approx \int_{\Omega^h} \hat{f}(\mathbf{X}^h, t) dV = \sum_{e=1}^{n^e} \int_{\Omega^e} \hat{f}(\mathbf{X}^h, t) dV = \sum_{e=1}^{n^e} \int_{\Omega_{\square}} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}) d\Omega_{\square} \\
 &= \sum_{e=1}^{n^e} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}) d\xi d\eta d\zeta,
 \end{aligned} \tag{B.20}$$

mit der Determinante der Jacobi-Matrix $\det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi})$. Im Allgemeinen stellt der Integrand $\hat{f}(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi})$ in Gl. (B.20) kein Polynom, sondern eine rationale Funktion dar. Die Integration über das Referenzelement wird daher durch eine numerische Quadratur, wie beispielsweise die Gauß-Quadratur, siehe exemplarisch [Schwarz und Köckler, 2011], realisiert. Dies führt auf die Näherung

$$\begin{aligned}
 &\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}) d\xi d\eta d\zeta \\
 &\approx \sum_{i,j,k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_{ijk} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}_{ijk}, t) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}_{ijk}) = \sum_{l=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_l \hat{f}(\boldsymbol{\xi}_l, t) \det \mathbf{J}^e(\boldsymbol{\xi}_l)
 \end{aligned} \tag{B.21}$$

mit den Quadraturknoten $\boldsymbol{\xi}_l = \{\xi_l, \eta_l, \zeta_l\}^T$, den Wichtungsfaktoren w_l und der Anzahl von Integrationspunkten n_{GP}^e .⁹ Durch einen Wechsel in den Variablen lautet eine entsprechende Approximation des Volumenintegrals in der Momentankonfiguration¹⁰

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \bar{f}(\mathbf{x}, t) dV &\approx \int_{\Omega^h} \bar{f}(\mathbf{x}^h, t) dV = \sum_{e=1}^{n^e} \int_{\Omega^e} \bar{f}(\mathbf{x}^h, t) dV = \sum_{e=1}^{n^e} \int_{\Omega_{\square}} \bar{f}(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}) d\Omega_{\square} \\ &= \sum_{e=1}^{n^e} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \bar{f}(\boldsymbol{\xi}, t) \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}) d\xi d\eta d\zeta \approx \sum_{l=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_l \bar{f}(\boldsymbol{\xi}_l, t) \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}_l). \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Aufgrund von Genauigkeit und Effizienz ist die Gauß-Quadratur ein verbreitetes Instrument zur Integration im Bereich der FEM. Tatsächlich kann gezeigt werden, dass die Gauß-Quadratur in einer Dimension optimal ist und ein Polynom vom Grad $p = 2n_{\text{GP}}^e - 1$ exakt integriert, siehe [Schwarz und Köckler, 2011, S. 323–332]. Im mehrdimensionalen Raum liegt diese Optimalität allerdings nicht mehr vor und es können effizientere Integrationsformeln für Hexaeder-Elemente angegeben werden, vgl. hierzu die Diskussionen in [Hammer und Stroud, 1958; Irons, 1971; Hellen, 1972]. Eine übersichtliche Auflistung der Gauß-Integrationsregeln kann [Wriggers, 2008; Dhett et al., 2012] entnommen werden.

Die Adaptierung der Gauß-Quadratur auf Dreieck- und Tetraeder-Elemente ist ohne die Einführung einer zusätzlichen lokalen Koordinatentransformation, siehe [Dhett et al., 2012], nicht möglich. Zur numerischen Integration dieser Elemente existieren daher angepasste Integrationsformeln, die ebenfalls auf einer Summe von gewichteten Funktionswerten aufbauen, siehe hierzu [Hammer et al., 1956; Felippa, 1966; Cowper, 1973; Felippa, 2004; Dhett et al., 2012; Zienkiewicz et al., 2013].

B.3 Matrixdarstellung und konsistente Linearisierung

Bei der Darstellung der globalen bzw. lokalen Gleichungsstrukturen im Kapitel 5 wird vornehmlich auf eine in [Hartmann, 2003] entwickelte Matrix-Vektor-Notation zurückgegriffen. Der folgende Abschnitt fasst die wesentlichen Matrixkonstrukte dieser Schreibweise zusammen. Darüber hinaus werden mit der konsistenten Linearisierung aus Abschnitt 5.4 in Zusammenhang stehende, dort nicht näher erläuterte matrizielle Beziehungen eingehender behandelt.

Die in Gl. (5.38) angegebene Verzerrungs-Verschiebungsmatrix $\tilde{\mathbf{B}}_{\text{u}}^e$ setzt sich aus den

⁹Die zur numerischen Auswertung des Integrals (B.20) applizierten Summen der Gauß-Quadratur für jede lokale Koordinatenrichtung werden zur Abkürzung der Notation in einer einzigen Summation zusammengefasst. Die Quadraturparameter lassen sich daher zu $\boldsymbol{\xi}_l \hat{=} \boldsymbol{\xi}_{ijk}$ und $w_l = w_{ijk}$ kombinieren.

¹⁰Unter der Voraussetzung, dass die zu approximierenden Volumenintegrale in der Referenz- und Momentankonfiguration eine identische physikalische Größe beschreiben, können die skalaren Dichtefunktionen durch die Beziehung $\hat{f}(\mathbf{X}, t) = \bar{f}(\mathbf{x}, t) \det \mathbf{F}$ ineinander umgerechnet werden, siehe auch Gleichung (2.59)₂.

knotenweise definierten Untermatrizen

$$\tilde{\mathbf{B}}_{\text{ua}}^e = \begin{bmatrix} F_{11}^e N_{a,X} & F_{21}^e N_{a,X} & F_{31}^e N_{a,X} \\ F_{12}^e N_{a,Y} & F_{22}^e N_{a,Y} & F_{32}^e N_{a,Y} \\ F_{13}^e N_{a,Z} & F_{23}^e N_{a,Z} & F_{33}^e N_{a,Z} \\ F_{11}^e N_{a,Y} + F_{12}^e N_{a,X} & F_{21}^e N_{a,Y} + F_{22}^e N_{a,X} & F_{31}^e N_{a,Y} + F_{32}^e N_{a,X} \\ F_{12}^e N_{a,Z} + F_{13}^e N_{a,Y} & F_{22}^e N_{a,Z} + F_{23}^e N_{a,Y} & F_{32}^e N_{a,Z} + F_{33}^e N_{a,Y} \\ F_{13}^e N_{a,X} + F_{11}^e N_{a,Z} & F_{23}^e N_{a,X} + F_{21}^e N_{a,Z} & F_{33}^e N_{a,X} + F_{31}^e N_{a,Z} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.23})$$

$a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, zusammen. Die Transformation des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungsvektors in den Cauchyschen Spannungsvektor, $\mathbf{T}^e = 1/J^e \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{T}}^e$, gelingt mit Hilfe des Push-Forward-Operators $\mathbf{F}_{23}^e = [\mathbf{F}^e \otimes \mathbf{F}^e]^{T_{23}}$. Für die zugrunde liegende Voigt Notation besitzt der Operator die Darstellung

$$\mathbf{F}_{23}^e = \begin{bmatrix} F_{11}F_{11} & F_{12}F_{12} & F_{13}F_{13} & 2F_{11}F_{12} & 2F_{12}F_{13} & 2F_{13}F_{11} \\ F_{21}F_{21} & F_{22}F_{22} & F_{23}F_{23} & 2F_{21}F_{22} & 2F_{22}F_{23} & 2F_{23}F_{21} \\ F_{31}F_{31} & F_{32}F_{32} & F_{33}F_{33} & 2F_{31}F_{32} & 2F_{32}F_{33} & 2F_{33}F_{31} \\ F_{11}F_{21} & F_{12}F_{22} & F_{13}F_{23} & F_{11}F_{22}+F_{12}F_{21} & F_{12}F_{23}+F_{13}F_{22} & F_{13}F_{21}+F_{11}F_{23} \\ F_{21}F_{31} & F_{22}F_{32} & F_{23}F_{33} & F_{21}F_{32}+F_{22}F_{31} & F_{22}F_{33}+F_{23}F_{32} & F_{23}F_{31}+F_{21}F_{33} \\ F_{31}F_{11} & F_{32}F_{12} & F_{33}F_{13} & F_{31}F_{12}+F_{32}F_{11} & F_{32}F_{13}+F_{33}F_{12} & F_{33}F_{11}+F_{31}F_{13} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{6 \times 6}, \quad (\text{B.24})$$

mit den Komponenten des Deformationsgradienten $F_{ij} = \mathbf{e}_i^T \mathbf{F}^e \mathbf{e}_j$.

Im Rahmen der in Abschnitt 5.4 behandelten konsistenten Linearisierung ergeben sich weitere Matrixkonstrukte, deren Aufbau im Folgenden angegeben werden soll. Für den Zusammenbau des geometrischen Anteils der mechanischen Elementsteifigkeitsmatrix $\mathbf{k}_{\text{uuG}}^e \in \mathbb{R}^{n_{\text{u}}^e \times n_{\text{u}}^e}$ wird gemäß Gl. (5.237) ein Dreifachprodukt aus dem nichtlinearen räumlichen Verschiebungsgradientenoperator

$$\mathbf{B}_{\text{NL}}^e = [\mathbf{B}_{\text{NL}1}^e \dots \mathbf{B}_{\text{NL}n_{\text{en}}}^e] \in \mathbb{R}^{9 \times n_{\text{u}}^e}, \quad \mathbf{B}_{\text{NL}a}^e = \begin{bmatrix} N_{a,x} & 0 & 0 \\ 0 & N_{a,y} & 0 \\ 0 & 0 & N_{a,z} \\ N_{a,y} & 0 & 0 \\ 0 & N_{a,z} & 0 \\ 0 & 0 & N_{a,x} \\ N_{a,z} & 0 & 0 \\ 0 & N_{a,x} & 0 \\ 0 & 0 & N_{a,y} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.25})$$

$a = 1, \dots, n_{\text{en}}$, und der die Komponenten des Cauchysche Spannungsvektors $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^6$ reorganisierenden symmetrischen Matrix

$$\mathbf{M}_{\mathbf{T}}^e = \begin{bmatrix} T_{11}^e & 0 & 0 & T_{12}^e & 0 & 0 & T_{31}^e & 0 & 0 \\ 0 & T_{22}^e & 0 & 0 & T_{23}^e & 0 & 0 & T_{12}^e & 0 \\ 0 & 0 & T_{33}^e & 0 & 0 & T_{31}^e & 0 & 0 & T_{23}^e \\ T_{12}^e & 0 & 0 & T_{22}^e & 0 & 0 & T_{23}^e & 0 & 0 \\ 0 & T_{23}^e & 0 & 0 & T_{33}^e & 0 & 0 & T_{31}^e & 0 \\ 0 & 0 & T_{31}^e & 0 & 0 & T_{11}^e & 0 & 0 & T_{12}^e \\ T_{31}^e & 0 & 0 & T_{23}^e & 0 & 0 & T_{33}^e & 0 & 0 \\ 0 & T_{12}^e & 0 & 0 & T_{31}^e & 0 & 0 & T_{11}^e & 0 \\ 0 & 0 & T_{23}^e & 0 & 0 & T_{12}^e & 0 & 0 & T_{22}^e \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{9 \times 9} \quad (\text{B.26})$$

ausgewertet. Die Bezeichnung als räumlicher Verschiebungsgradientenoperator für \mathbf{B}_{NL}^e rührt aus der Darstellung des inkrementellen Verschiebungsgradienten als Spaltenvektor:

$$\Delta \mathbf{h}^e = \{\Delta h_{11}^e, \Delta h_{22}^e, \Delta h_{33}^e, \Delta h_{12}^e, \Delta h_{23}^e, \Delta h_{31}^e, \Delta h_{13}^e, \Delta h_{21}^e, \Delta h_{32}^e\}^T = \mathbf{B}_{\text{NL}}^e \mathbf{u}^e \in \mathbb{R}^9$$

Für weitere Details zu diesem Linearisierungsschritt bei festgehaltenen Spannungen sei exemplarisch auf [Hartmann, 2003, S. 123–126] verwiesen.

Zur Konstruktion des aus dem Konstitutivmodell herrührenden Anteils der mechanischen Elementsteifigkeitsmatrix $\mathbf{k}_{\text{uuC}}^e \in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_u^e}$ wird der durch Simo und Taylor [1985] geprägte konsistente Tangentenoperator benötigt. In zahlreichen wissenschaftlichen Veröffentlichungen werden die konsistenten Tangentenoperatoren als Tensoren vierter Stufe spezifiziert. Die in Abschnitt 5.1 vorgestellte FEM-Raumdiskretisierung baut jedoch auf einer matriziellen Formulierung auf, sodass eine Transformation dieser Tensoren höherer Stufe in eine konforme Matrixgestalt erforderlich ist. Unter Ausnutzung der in der vorliegenden Arbeit verwendeten Voigt Notation für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor (5.35) und den Greenschen Verzerrungstensor (5.45) besitzt die konsistente Tangente in der Referenzkonfiguration $\tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^{e(k)}$ die Komponentendarstellung

$$\tilde{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}}^e = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{1111}^e & \tilde{C}_{1122}^e & \tilde{C}_{1133}^e & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{1112}^e + \tilde{C}_{1121}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{1123}^e + \tilde{C}_{1132}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{1131}^e + \tilde{C}_{1113}^e) \\ \tilde{C}_{2211}^e & \tilde{C}_{2222}^e & \tilde{C}_{2233}^e & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{2212}^e + \tilde{C}_{2221}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{2223}^e + \tilde{C}_{2232}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{2231}^e + \tilde{C}_{2213}^e) \\ \tilde{C}_{3311}^e & \tilde{C}_{3322}^e & \tilde{C}_{3333}^e & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{3312}^e + \tilde{C}_{3321}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{3323}^e + \tilde{C}_{3332}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{3331}^e + \tilde{C}_{3313}^e) \\ \tilde{C}_{1211}^e & \tilde{C}_{1222}^e & \tilde{C}_{1233}^e & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{1212}^e + \tilde{C}_{1221}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{1223}^e + \tilde{C}_{1232}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{1231}^e + \tilde{C}_{1213}^e) \\ \tilde{C}_{2311}^e & \tilde{C}_{2322}^e & \tilde{C}_{2333}^e & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{2312}^e + \tilde{C}_{2321}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{2323}^e + \tilde{C}_{2332}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{2331}^e + \tilde{C}_{2313}^e) \\ \tilde{C}_{3111}^e & \tilde{C}_{3122}^e & \tilde{C}_{3133}^e & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{3112}^e + \tilde{C}_{3121}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{3123}^e + \tilde{C}_{3132}^e) & \frac{1}{2}(\tilde{C}_{3131}^e + \tilde{C}_{3113}^e) \end{bmatrix}. \quad (\text{B.27})$$

Bezugnehmend auf die schwache Formulierung der Wärmeleitungsgleichung (4.39) zeigt beispielsweise Netz [2013], dass sich das Gateaux-Differential des Anteils $\delta\pi_\kappa$ in dem Ausdruck

$$\begin{aligned} D_{\vec{u}} \delta\pi_\kappa(\vec{u}, \Theta, \delta\Theta)[\Delta\vec{u}] &= \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \kappa \mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \delta\Theta \cdot \mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \Theta \overbrace{(\mathbf{J}\mathbf{F}^{-T} \cdot \Delta\mathbf{H})}^{D_{\vec{u}} J(\vec{u})[\Delta\vec{u}]} dV \\ &\quad - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \kappa J (\text{Grad } \delta\Theta)^T \mathbf{F}^{-1} \Delta\mathbf{H} \mathbf{F}^{-1} \cdot (\mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \Theta)^T dV \\ &\quad - \int_{\mathcal{R}[\mathcal{B}]} \kappa J (\text{Grad } \delta\Theta)^T \mathbf{F}^{-1} \cdot (\text{Grad } \Theta)^T \mathbf{F}^{-1} \Delta\mathbf{H} \mathbf{F}^{-1} dV, \quad (\text{B.28}) \end{aligned}$$

mit dem thermischen Konduktivitätstensor $\kappa_{\text{R}} = \hat{\kappa}(\Theta) \mathbf{J} \mathbf{C}^{-1}$, dem Inkrement des materiellen Verschiebungsgradienten $\Delta\mathbf{H} = \text{Grad } \Delta\vec{u}$ und der Abkürzung $J := \det \mathbf{F}$, manifestiert. Unter Ausnutzung der Transformationsbeziehungen

$$\Delta \mathbf{h} = \text{grad } \Delta\vec{u} = \Delta\mathbf{H} \mathbf{F}^{-1}, \quad \text{grad } \Theta = \mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \Theta, \quad \text{grad } \delta\Theta = \mathbf{F}^{-T} \text{Grad } \delta\Theta, \quad dv = J dV$$

lässt sich die linearisierte Form (B.28) in der räumlichen Darstellung als

$$\begin{aligned} D_{\vec{u}} \delta \pi_{\kappa}(\vec{u}, \Theta, \delta \Theta)[\Delta \vec{u}] &= \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \operatorname{grad} \delta \Theta \cdot \operatorname{grad} \Theta (\operatorname{tr} \Delta \mathbf{h}) dv \\ &\quad - \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \left((\operatorname{grad} \delta \Theta)^T \Delta \mathbf{h} \cdot (\operatorname{grad} \Theta)^T + (\operatorname{grad} \delta \Theta)^T \cdot (\operatorname{grad} \Theta)^T \Delta \mathbf{h} \right) dv \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

angeben. Die Vereinnahmung der Identitäten

$$(\operatorname{grad} \delta \Theta)^T \Delta \mathbf{h} \cdot (\operatorname{grad} \Theta)^T = \operatorname{grad} \delta \Theta (\operatorname{grad} \Theta)^T \cdot \Delta \mathbf{h}, \quad (\text{B.30})$$

$$(\operatorname{grad} \delta \Theta)^T \cdot (\operatorname{grad} \Theta)^T \Delta \mathbf{h} = \operatorname{grad} \delta \Theta (\operatorname{grad} \Theta)^T \cdot (\Delta \mathbf{h})^T, \quad (\text{B.31})$$

$$\operatorname{tr} \Delta \mathbf{h} = \operatorname{tr}(\operatorname{sym} \Delta \mathbf{h}) = \operatorname{div} \Delta \vec{u}, \quad \text{mit} \quad (\text{B.32})$$

$$\operatorname{sym} \Delta \mathbf{h} = \frac{1}{2} (\Delta \mathbf{h} + \Delta \mathbf{h}^T) = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \Delta \vec{u} + (\operatorname{grad} \Delta \vec{u})^T), \quad (\text{B.33})$$

vereinfacht den Ausdruck (B.29) zu

$$\begin{aligned} D_{\vec{u}} \delta \pi_{\kappa}(\vec{u}, \Theta, \delta \Theta)[\Delta \vec{u}] &= \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \operatorname{grad} \delta \Theta \cdot \operatorname{grad} \Theta (\operatorname{tr}(\operatorname{sym} \Delta \mathbf{h})) dv \\ &\quad - 2 \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \operatorname{grad} \delta \Theta (\operatorname{grad} \Theta)^T \cdot \operatorname{sym} \Delta \mathbf{h} dv. \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

Weiterhin liefert nur der symmetrische Anteil des Tensors $\operatorname{grad} \delta \Theta (\operatorname{grad} \Theta)^T$ einen Beitrag zum Skalarprodukt des zweiten Summanden in Gl. (B.34), sodass sich Gl. (B.34) zu

$$\begin{aligned} D_{\vec{u}} \delta \pi_{\kappa}(\vec{u}, \Theta, \delta \Theta)[\Delta \vec{u}] &= \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \operatorname{grad} \delta \Theta \cdot \operatorname{grad} \Theta (\operatorname{tr}(\operatorname{sym} \Delta \mathbf{h})) dv \\ &\quad - 2 \int_{\chi_t[\mathcal{B}]} \kappa \operatorname{sym} \left(\operatorname{grad} \delta \Theta (\operatorname{grad} \Theta)^T \right) \cdot \operatorname{sym} \Delta \mathbf{h} dv \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

umformen lässt. Auf Basis des linearisierten Ausdrucks (B.35) kann nun eine mit finiten Elementen räumlich diskretisierte, konsistente Linearisierungsvorschrift entworfen werden. Die auf das Elementgebiet heruntergebrochenen Interpolationsformeln für den primären und virtuellen Temperaturgradienten wurden dabei bereits in den Gl. (5.83) und (5.84) eingeführt. Kongruent zu Gl. (5.47) wird auch der symmetrische Anteil des inkrementellen räumlichen Verschiebungsgradienten (B.30)₄ in die Voigt Notation

$$\operatorname{sym} \Delta \mathbf{h} = \{\Delta h_{11}, \Delta h_{22}, \Delta h_{33}, (\Delta h_{12} + \Delta h_{21}), (\Delta h_{23} + \Delta h_{32}), (\Delta h_{31} + \Delta h_{13})\}^T \in \mathbb{R}^6$$

überführt, sodass eine Feldinterpolation, vgl. auch mit Gl. (5.50), gemäß der Vorschrift

$$\operatorname{sym} \Delta \mathbf{h}^h(\mathbf{x}^h, t) = \operatorname{sym} \Delta \mathbf{h}^e(\phi_t^e(\mathbf{x}^h), \Delta \mathbf{u}^e) = \mathbf{B}_u^e \Delta \mathbf{u}^e = \mathbf{B}_u^e \mathbf{Z}_u^e \Delta \mathbf{u} \quad (\text{B.36})$$

erfolgt. Die auf $\text{sym}\Delta\mathbf{h} \in \mathbb{R}^6$ angewendete Spuroperation lässt sich auf lokaler Ebene in Gestalt des Skalarproduktes

$$\text{tr} [\text{sym}\Delta\mathbf{h}^e] = \mathbf{e}^T \text{sym}\Delta\mathbf{h}^e = \mathbf{e}^T \mathbf{B}_u^e \Delta\mathbf{u}^e, \quad \text{mit} \quad \mathbf{e} = \{1, 1, 1, 0, 0, 0\}^T \in \mathbb{R}^6, \quad (\text{B.37})$$

formulieren. Den Abschluss der Raumdiskretisierung für den linearisierten Variationsanteil (B.35) bildet das Aufstellen einer Beziehung für

$$\begin{aligned} \text{sym} [\{\text{grad } \delta\Theta\} \{\text{grad } \Theta\}^T] &= \frac{1}{2} [\{\text{grad } \delta\Theta\} \{\text{grad } \Theta\}^T + \{\text{grad } \Theta\} \{\text{grad } \delta\Theta\}^T] \\ &= \begin{bmatrix} \delta\Theta_{,x}\Theta_{,x} & \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,x}\Theta_{,y} + \delta\Theta_{,y}\Theta_{,x}) & \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,x}\Theta_{,z} + \delta\Theta_{,z}\Theta_{,x}) \\ \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,y}\Theta_{,x} + \delta\Theta_{,x}\Theta_{,y}) & \delta\Theta_{,y}\Theta_{,y} & \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,y}\Theta_{,z} + \delta\Theta_{,z}\Theta_{,y}) \\ \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,z}\Theta_{,x} + \delta\Theta_{,x}\Theta_{,z}) & \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,z}\Theta_{,y} + \delta\Theta_{,y}\Theta_{,z}) & \delta\Theta_{,z}\Theta_{,z} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

mit $\text{grad } \Theta = \{\Theta_{,x}, \Theta_{,y}, \Theta_{,z}\}^T \in \mathbb{R}^3$ und $\text{grad } \delta\Theta = \{\delta\Theta_{,x}, \delta\Theta_{,y}, \delta\Theta_{,z}\}^T \in \mathbb{R}^3$. Um ein konsistentes Skalarprodukt zwischen dem symmetrischen Anteil des dyadischen Produkts aus virtuellen und primären Temperaturgradienten und $\text{sym}\Delta\mathbf{h} \in \mathbb{R}^6$ auszuwerten, wird erstere matrizielle Größe ebenfalls in einen Spaltenvektor $\text{sym}\delta\mathbf{h}_\kappa \in \mathbb{R}^6$, der die Symmetrieeigenschaften von Gl. (B.38) vererbt bekommt, transformiert. Es gilt:

$$\begin{aligned} \text{sym}\delta\mathbf{h}_\kappa &= \{\delta\Theta_{,x}\Theta_{,x}, \delta\Theta_{,y}\Theta_{,y}, \delta\Theta_{,z}\Theta_{,z}, \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,x}\Theta_{,y} + \delta\Theta_{,y}\Theta_{,x}), \\ &\quad \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,y}\Theta_{,z} + \delta\Theta_{,z}\Theta_{,y}), \frac{1}{2}(\delta\Theta_{,z}\Theta_{,x} + \delta\Theta_{,x}\Theta_{,z})\}^T \in \mathbb{R}^6 \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Das elementbezogene Analogon lautet

$$\delta\mathbf{h}_\kappa^e = \mathbf{M}_{\text{NL}}^{eT} \delta\Theta^e \quad \text{bzw.} \quad \delta\mathbf{h}_\kappa^{eT} = \delta\Theta^{eT} \mathbf{M}_{\text{NL}}^e, \quad (\text{B.40})$$

mit

$$\mathbf{M}_{\text{NL}}^{eT} = \begin{bmatrix} N_{1,x}\Theta_{,x} & \dots & N_{n_{\text{en}},x}\Theta_{,x} \\ N_{1,y}\Theta_{,y} & \dots & N_{n_{\text{en}},y}\Theta_{,y} \\ N_{1,z}\Theta_{,z} & \dots & N_{n_{\text{en}},z}\Theta_{,z} \\ \frac{1}{2}(N_{1,x}\Theta_{,y} + N_{1,y}\Theta_{,x}) & \dots & \frac{1}{2}(N_{n_{\text{en}},x}\Theta_{,y} + N_{n_{\text{en}},y}\Theta_{,x}) \\ \frac{1}{2}(N_{1,y}\Theta_{,z} + N_{1,z}\Theta_{,y}) & \dots & \frac{1}{2}(N_{n_{\text{en}},y}\Theta_{,z} + N_{n_{\text{en}},z}\Theta_{,y}) \\ \frac{1}{2}(N_{1,z}\Theta_{,x} + N_{1,x}\Theta_{,z}) & \dots & \frac{1}{2}(N_{n_{\text{en}},z}\Theta_{,x} + N_{n_{\text{en}},x}\Theta_{,z}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{6 \times n_\Theta^e} \quad (\text{B.41})$$

und $\gamma_\Theta^e := \text{grad } \hat{\Theta}^e = \{\hat{\Theta}_{,x}^e, \hat{\Theta}_{,y}^e, \hat{\Theta}_{,z}^e\}^T = \mathbf{B}_\Theta^e \Theta^e$. Die Substitution der Beziehungen (B.36), (B.37) und (B.39) in Gl. (B.35) und die Applikation einer der Verfahrensvorschriften für die in den Abschnitten 5.2.2 und 5.2.4 spezifizierten Zeitintegrationsalgorithmen münden schließlich in dem globalen diskreten Ausdruck

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \delta\pi_\kappa^h(\mathbf{U}, \Theta, \delta\Theta, T)[\Delta\mathbf{U}] &= \delta\Theta^T \left\{ \nu_L \sum_{e=1}^{n^e} \mathbf{z}_\Theta^{eT} \right. \\ &\quad \left. \overbrace{\left[\sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \kappa^{e(k)} \left[\mathbf{B}_\Theta^{e(k)T} \gamma_\Theta^{e(k)} \mathbf{e}^T - 2\mathbf{M}_{\text{NL}}^{e(k)} \right] \mathbf{B}_u^{e(k)} \det \mathbf{j}^{e(k)} \right]}^{\mathbf{k}_{\Theta_u|\kappa}^e} \mathbf{z}_u^e \Delta\mathbf{U} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

wobei zur Darstellung von Gl. (B.42) die in Abschnitt 5.4 im Rahmen des konsistenten Linearisierungsprozesses geprägte Nomenklatur zur Vereinheitlichung der Integratoren Anwendung findet. Der in Form der horizontal geschweiften Klammer gekennzeichnete Beitrag entspricht der in Gl. (5.283) angegebenen elementbezogenen Funktionalmatrix $\mathbf{k}_{\Theta u|\kappa}^e \in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_u^e}$.

B.4 Raumdiskretisierungsfehler

Der folgende Abschnitt gibt im Rahmen der numerischen Lösung von elliptischen Randwertaufgaben, also beispielsweise für Randwertprobleme aus dem Bereich der quasistatischen Strukturmechanik, mit Hilfe der in Abschnitt 5.1 beschriebenen isoparametrischen Finiten-Elemente-Methode eine kompakte Übersicht zu den charakteristischen räumlichen Konvergenzeigenschaften solch einer Formulierung.¹¹ Das Aufzeigen letzterer Eigenschaften, wie z. B. der Konvergenz für die Größe des Raumdiskretisierungsfehlers,¹² ist erforderlich zur Rechtfertigung der Genauigkeit einer mittels der Finiten-Elemente-Methode generierten numerischen Approximationslösung sowie für den Nachweis, dass das partielle Differentialgleichungssystem des zugrunde liegenden mathematischen Modells korrekt gelöst wird. Idealerweise strebt dabei die numerische Näherungslösung mit einer möglichst hohen Konvergenzrate bei einheitlicher Netzverfeinerung, wobei die entsprechende Gebietszerlegung \mathcal{I}_h durch eine charakteristische Elementlänge h klassifiziert wird,¹³ im Grenzübergang $h \rightarrow 0$ gegen die exakte Strukturantwort.¹⁴ In der einschlägigen Fachliteratur wird als Ursache für den an eine Finite-Elemente-Diskretisierung geknüpften Approximationsfehler im Raum (Raumdiskretisierungsfehler) vornehmlich die Wahl des aus den Ansatzfunktionen konstruierten endlichdimensionalen Lösungsraums angeführt. Im Rahmen des angewendeten isoparametrischen Elementkonzepts schließt diese Aussage neben den durch die Interpolation der Lösungsvariablen verursachten Fehler auch den durch die facettierte Geometriewiedergabe von gekrümmten Berandungen induzierten

¹¹Die nachfolgenden Aussagen beziehen sich auf eine konforme Finite-Elemente-Methode.

¹²Im Rahmen allgemeiner zeitabhängiger Problemstellungen entspricht der aus dem Diskretisierungsprozess hervorgehende Gesamtfehler einer nicht separierbaren Akkumulation von Raum- und Zeitdiskretisierungsfehler. Letzter ist allerdings im folgenden Abschnitt aufgrund der elliptischen Struktur der Systemgleichungen nicht präsent.

¹³Die charakteristische Elementlänge h ist ein spezifischer, der räumlichen Diskretisierung \mathcal{I}_h zugeordneter Parameter, welcher die Feinheit von \mathcal{I}_h beschreibt. Häufig wird h im \mathbb{R}^2 als der Durchmesser eines Kreises, der das größte Element innerhalb der Vernetzung \mathcal{I}_h umhüllt, definiert, siehe z. B. [Hughes, 2000; Wriggers, 2008]. Für den dreidimensionalen Fall bildet eine Kugel den das größte Element in \mathcal{I}_h umschließenden Hüllkörper. In der vorliegenden Arbeit wird allerdings von dieser Definition abgewichen und h durch eine arithmetische Mittelwertbildung über sämtliche n^e Kontinuums-elemente der Struktur bestimmt:

$$h = \frac{1}{n^e} \sum_{e=1}^{n^e} \max L^e. \quad (\text{B.43})$$

In Gl. (B.43) symbolisiert dabei $\max L^e$ die größte Diagonalabmessung innerhalb des betrachteten Elements e , $e = 1, \dots, n^e$

¹⁴Die Untersuchung des Konvergenzverhaltens eines Diskretisierungsschemas gibt darüber Auskunft, ob die von den Grundgleichungen des mathematischen Modells auferlegten Bedingungen von den Lösungsvariablen der numerischen Näherungslösung erfüllt werden.

Modellierungsfehler ein. Beide Fehlerressourcen sind untrennbar miteinander verbunden.¹⁵ Für eine fundierte und rigorose Beschreibung dieses Themenkomplexes u. a. mit Bezug zu adaptiven Raumdiskretisierungsstrategien sei auf die Monographien von Strang und Fix [1973], Hughes [2000], Bathe [2002], Braess [2007] und Wriggers [2008] verwiesen.

Wie in den angegebenen Referenzen nachzulesen ist, konvergiert ein mit der Standard-Finite-Elemente-Methode aus Abschnitt 5.1 diskretisiertes elliptisches Variationsproblem nur, falls der den elementbezogenen Formfunktionen zugeordnete vollständige Polynomgrad \hat{p} die Ungleichung $\hat{p} + 1 > m$, mit der höchsten im betrachteten Variationsproblem vorkommenden Ableitungsordnung m , erfüllt. In Bezug auf Problemstellungen aus der Strukturmechanik, mit $m = 1$, wird damit die Darstellung von Starrkörperbewegungen und konstanten Verzerrungszuständen sichergestellt. Weiterhin kann gezeigt werden, dass für die in allgemeiner Form durch das kontinuierliche Funktional

$$\begin{aligned} \pi_u(\mathbf{u}) &:= \frac{1}{2}a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - f(\mathbf{u}) \rightarrow \min, \quad \text{mit} \\ a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) &= \int_{\Omega} \mathbf{E}_L^T \mathbf{T}(\mathbf{E}_L) dV, \quad f(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \varrho \mathbf{k}^T \mathbf{u} dV + \int_{\Gamma_s} \mathbf{t}^T \mathbf{u} dA, \\ \mathbf{E}_L &= \{E_{L11}, E_{L22}, E_{L33}, 2E_{L12}, 2E_{L23}, 2E_{L31}\}^T, \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

beschriebenen linearen Probleme die berechnete FE-Lösung $\mathbf{u}^h \in \hat{\mathcal{S}}_u^h$, unter sämtlichen anderen Funktionen $\mathbf{u}^{*h} = \mathbf{u}^h + \boldsymbol{\eta}^h$, $\mathbf{u}^{*h} \in \hat{\mathcal{S}}_u^h$, mit $\boldsymbol{\eta}^h \in \hat{\mathcal{V}}_u^h$, aus dem diskretisierten Funktionsraum $\hat{\mathcal{S}}_u^h \subset \hat{\mathcal{S}}_u$, den in der Energienorm ausgedrückten Raumdiskretisierungsfehler

$$\|\mathbf{u}\|_E := \sqrt{\frac{1}{2}a(\mathbf{u}, \mathbf{u})} \quad (\text{B.45})$$

minimiert.¹⁶ Der Nachweis zu dieser Aussage basiert auf der in der Energienorm gemessenen Orthogonalität des Raumdiskretisierungsfehlers $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t)$ zwischen der exakten Verschiebungsantwort $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}}$ und der aus dem eingeschränkten Funktionsraum $\hat{\mathcal{S}}_u^h \subset \hat{\mathcal{S}}_u$ stammenden Näherungslösung $\mathbf{u}^h(\mathbf{x}^h, t) \in \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}}$:

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \boldsymbol{\eta}^h) &= 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta}^h \in \hat{\mathcal{V}}_u^h \quad \text{oder} \quad \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_E = \min_{\mathbf{u}^{*h} \in \hat{\mathcal{S}}_u^h} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^{*h}\|_E \\ &\text{bzw. äquivalent hierzu} \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

$$a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u} - \mathbf{u}^h) \leq a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^{*h}, \mathbf{u} - \mathbf{u}^{*h}) \quad \forall \mathbf{u}^{*h} \in \hat{\mathcal{S}}_u^h$$

¹⁵Insbesondere die Geometrieapproximation von gekrümmten Berandungen, welche für die in diesen Bereichen angrenzenden Kontinuumsselemente große geometrische Verzerrungen zur Folge haben kann, bereiten beim Nachweis entsprechender theoretischer Konvergenzaussagen erhebliche Schwierigkeiten, siehe z. B. [Bathe, 2002, S. 444–452].

¹⁶Analog zu Abschnitt 5.1 kennzeichnet $\hat{\mathcal{V}}_u^h \subset \hat{\mathcal{V}}_u$ eine diskretisierte Version des kontinuierlichen Test- bzw. Gewichtsraums $\hat{\mathcal{V}}_u$, vgl. Gl. (4.23), dessen Elemente $\boldsymbol{\eta}^h \in \hat{\mathcal{V}}_u^h$ auf dem räumlich parametrisierten Dirichlet-Rand Γ_u^h verschwinden. Hierdurch erfüllen sämtliche Funktionen $\boldsymbol{\eta}^h \in \hat{\mathcal{V}}_u^h$ aus $\hat{\mathcal{V}}_u^h$ entsprechende homogene Randbedingungen auf Γ_u^h , die für die Formulierung des Prinzips der virtuellen Verschiebungen von essentieller Bedeutung sind. Der Funktionssatz $\hat{\mathcal{S}}_u^h \subset \hat{\mathcal{S}}_u$, aus dem die approximierte Lösung $\mathbf{u}^h \in \hat{\mathcal{S}}_u^h$ stammt, unterscheidet sich von $\hat{\mathcal{V}}_u^h$ durch den Einbau der auf Γ_u^h definierten wesentlichen Randbedingungen (Dirichlet-Randbedingungen).

Ohne Kenntnis der exakten Lösung \mathbf{u} repräsentiert demnach in Bezug auf die in Gl. (B.45) eingeführte Energienorm das mit der Diskretisierung \mathcal{I}_h verknüpfte Verschiebungsfeld \mathbf{u}^h die bestmögliche Approximation für \mathbf{u} .¹⁷ In der oben verwendeten abstrakten Notation für die Minimierungsvorschrift des Gesamtpotentials $\pi_u(\mathbf{u})$, siehe Gl. (B.44), sowie den Beziehungen (B.45) und (B.46) charakterisieren $a(\mathbf{u}, \mathbf{u})$ die vielfach zitierte Bilinearform des Variationsproblems, siehe z. B. [Hughes, 2000; Szabó et al., 2004; Wriggers, 2008], und $f(\mathbf{u})$ das lineare Funktional der externen Systemenergie. Außerdem repräsentiert der Radikand in Gl. (B.45) im Rahmen der betrachteten linearen Elastizitätstheorie die interne System- bzw. Formänderungsenergie $\psi(\mathbf{E}_L) = 1/2 a(\mathbf{u}, \mathbf{u})$, sodass die Definition der Energienorm (B.45) äquivalent zu

$$\|\mathbf{u}\|_E := \sqrt{\psi(\mathbf{E}_L)} \quad (\text{B.47})$$

ist.

Im Allgemeinen lässt sich für die in der vorliegenden Arbeit vorgestellte h-Version der Finite-Elemente-Methode zur Behandlung von glatten Problemstellungen die folgende asymptotische Konvergenzaussage

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^s} = \mathcal{O}(h^\beta) \text{ bzw. } \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^s} \leq Ch^\beta, \quad \beta = \min(\hat{p} + 1 - s, 2(\hat{p} + 1 - m)), \quad (\text{B.48})$$

mit einer an die räumliche Regularität von $\mathbf{u} = \{u_1, u_2, u_3\}^T$ gebundenen positiven Konstanten C und der dem Sobolev-Funktionsraum \mathcal{H}^s zugeordneten Norm

$$\|\mathbf{u}\|_{\mathcal{H}^s} = \sqrt{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle_{\mathcal{H}^s}}, \quad (\text{B.49})$$

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle_{\mathcal{H}^s} = \int_{\Omega} \left(\overbrace{\sum_{i=1}^3 u_i u_i}^{\mathbf{u}^T \mathbf{u}} + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 u_{i,j} u_{i,j} + \dots + \overbrace{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \dots \sum_{l=1}^3 u_{i,jk\dots l} u_{i,jk\dots l}}^{s+1 \text{ Indizes}} \right) dV,$$

aufstellen, siehe hierzu [Babuška und Szabó, 1982; Wriggers, 2008].¹⁸ Gl. (B.48) beschreibt eine a priori Diskretisierungsfehlerabschätzung in Gestalt eines algebraischen Konvergenztyps,¹⁹ mit der Konvergenzrate β . Es ist offensichtlich, dass die Auswertung einer generellen Sobolev-Norm (B.49) sehr aufwendig sein kann. Diesem Umstand

¹⁷Gemäß den Darstellungen in [Hughes, 2000] ist die Näherungslösung \mathbf{u}^h aus dem von \mathcal{I}_h abgeleiteten Funktionsraum $\hat{\mathcal{S}}_u^h \subset \hat{\mathcal{S}}_u$ auch als die beste Kleinste-Quadrate-Approximation (Least-Square-Fit) der exakten Lösung \mathbf{u} in Bezug auf den Operator $a(\cdot, \cdot)$ interpretierbar. Die Aussagen aus Gl. (B.46) implizieren nicht, dass \mathbf{u}^h die Fehlerdistanz zu \mathbf{u} minimiert. Lediglich die ersten partiellen Ableitungen von \mathbf{u}^h sind in einem gemittelten Sinne bestmöglich an die ersten partiellen Ableitungen von \mathbf{u} angepasst. Im Rahmen der betrachteten linearen Elastizitätstheorie induziert diese Aussage, dass die geometrisch linearisierten Verzerrungsmaße oder Spannungen optimiert abgebildet werden.

¹⁸In Gl. (B.49) symbolisiert die Kurzschreibweise $u_{i,j}$ eine partielle Ableitung der Komponenten des Verschiebungsvektors $\mathbf{u} = \{u_1, u_2, u_3\}^T$ nach den Raumkoordinaten $x = x_1, y = x_2$ und $z = x_3$, d. h. für den dreidimensionalen Fall $\partial u_i / \partial x_j, i, j = 1, \dots, 3$.

¹⁹In die Bestimmung der Konvergenzordnung β , also dem Exponenten der Fehlerabschätzung (B.48), fließen lediglich Informationen über a priori bekannte Größen, wie z. B. den vollständigen Polynomgrad \hat{p} , der höchsten im betrachteten Variationsproblem vorkommenden Ableitungsordnung m und Annahmen an die räumliche Regularität (Glattheit) der exakten Lösung \mathbf{u} ein, siehe hierzu [Hughes, 2000]. Die Quantifizierung des letzteren Einflussfaktor, der Glattheit der Lösung \mathbf{u} , ist jedoch mitunter nicht immer

Rechnung tragend, haben sich daher zur Beurteilung des Approximationsfehlers in der Praxis die sogenannte H^0 - bzw. \mathcal{L}^2 -Norm $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{L}^2} = \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^0}$, mit $s = 0$, und die H^1 -Norm $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^1}$, mit $s = 1$, etabliert. Die konsequente Umsetzung von Gl. (B.49) für $s = 0$ bzw. $s = 1$ führt dann auf die Definitionen

$$\|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2} = \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{H}^0} = \sqrt{\int_{\Omega} \mathbf{u}^T \mathbf{u} dV} = \sqrt{\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 u_i u_i dV} \quad (\text{B.50})$$

und

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{H}^1} &= \sqrt{\int_{\Omega} \left(\mathbf{u}^T \mathbf{u} + \text{tr} \left[[\text{grad } \mathbf{u}]^T \text{grad } \mathbf{u} \right] \right) dV} \\ &= \sqrt{\int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^3 u_i u_i + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 u_{i,j} u_{i,j} \right) dV}. \end{aligned} \quad (\text{B.51})$$

Werden die Berechnungsvorschriften (B.50) und (B.51) auf den Raumdiskretisierungsfehler $\mathbf{u} - \mathbf{u}^h$ appliziert, resultieren als zugehörige Konvergenzrate für die H^0 - oder \mathcal{L}^2 -Norm

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{L}^2} &= \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^0} = \sqrt{\int_{\Omega} \{ \mathbf{u} - \mathbf{u}^h \}^T \{ \mathbf{u} - \mathbf{u}^h \} dV} \\ &= \sqrt{\int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 (u_i - u_i^h)(u_i - u_i^h) dV} \end{aligned} \quad (\text{B.52})$$

der Exponent $\beta = \min(\hat{p} + 1, 2\hat{p}) = \hat{p} + 1$ bzw. in Form einer Abschätzung $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{L}^2} = \mathcal{O}(h^{\hat{p}+1})$ und in Bezug auf einen in der H^1 -Norm gemessenen Approximationsfehler

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^1} = \sqrt{\int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^3 (u_i - u_i^h)(u_i - u_i^h) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (u_{i,j} - u_{i,j}^h)(u_{i,j} - u_{i,j}^h) \right) dV} \quad (\text{B.53})$$

die Konvergenzordnung $\beta = \min(\hat{p}, 2\hat{p}) = \hat{p}$ bzw. $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^1} = \mathcal{O}(h^{\hat{p}})$. Wie weiter oben bereits gezeigt wurde, ist die Energienorm $\|\mathbf{u}\|_{\text{E}}$ auf natürliche Weise mit dem elastischen Problem verknüpft und infolge der Gültigkeit von

$$C_1 \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{H}^1} \leq \|\mathbf{u}\|_{\text{E}} \leq C_2 \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{H}^1},$$

trivial. Dies gilt insbesondere für Kontaktprobleme. Die Einordnung der exakten Lösung \mathbf{u} in einen entsprechenden Sobolev-Funktionsraum \mathcal{H}^r , mit der räumlichen Regularität $r \geq 0$, hängt vornehmlich vom verwendeten Rechengebiet, der rechten Seite des Variationsproblems und den applizierten Randbedingungen ab. In der einschlägigen Spezialliteratur ist daher von einer a priori Fehlerabschätzung die Rede. Ein Problem einer solchen oberen Fehlerschranke ist das Auffinden der Konstanten C in Gl. (B.48)₂. Hierfür ist anzumerken, dass die Bestimmung der positiven Fehlerkonstante C die Kenntnis der exakten Lösung \mathbf{u} voraussetzt. Dies gelingt jedoch nur in wenigen Ausnahmefällen bei denen eine analytische Lösung für die behandelte Randwertaufgabe existiert. Darüber hinaus hängt C vom verwendeten Elementtyp sowie den geometrischen Elementverzerrungen ab. Eine direkte Abhängigkeit von der Konstanten in Bezug auf die charakteristische Elementlänge h liegt nicht vor.

mit den positiven Konstanten $C_1 > 0$ und $C_2 > 0$, zur H^1 -Norm $\|\mathbf{u}\|_{\mathcal{H}^1}$ äquivalent, siehe [Hughes, 2000]. Dieser Sachverhalt impliziert, dass im Folgenden das Fehlermaß $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{H}^1}$ durch das einfacher auszuwertende Pendant in der Energienorm

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_E = \sqrt{\frac{1}{2}a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u} - \mathbf{u}^h)} = \sqrt{\psi(\mathbf{E}_L - \mathbf{E}_L^h)} \quad (\text{B.54})$$

substituiert wird. Die asymptotischen Konvergenzaussagen bleiben hiervon jedoch unberührt, d. h. es gilt weiterhin $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_E = \mathcal{O}(h^{\hat{p}})$. Um den Berechnungsaufwand zur Bestimmung von $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_E$ weiter zu reduzieren, findet häufig auch die Näherung

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_E &\approx \sqrt{|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h|_E}, \quad \text{mit} \\ |\mathbf{u} - \mathbf{u}^h|_E &:= \frac{1}{2}|a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - a(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h)| = |\psi(\mathbf{E}_L) - \psi(\mathbf{E}_L^h)|, \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

Anwendung, siehe exemplarisch [Bathe, 2002; Zienkiewicz et al., 2013]. Hierbei wird schlicht der Absolutbetrag der Differenz zwischen der Verzerrungsenergie der exakten Lösung $\psi(\mathbf{E}_L) = 1/2a(\mathbf{u}, \mathbf{u})$ und der Formänderungsenergie der FE-Approximation $\psi(\mathbf{E}_L^h) = 1/2a(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h)$ gebildet.²⁰

Konkrete Anleitungen zur technischen Durchführung einer Raumkonvergenzstudie sind in der einschlägigen Fachliteratur rar. Aus diesem Grund versucht der folgende Beitrag hier Abhilfe zu schaffen. Die bisherigen Ausführungen gingen im Sinne der klassischen Methode nach Bubnov-Galerkin stets davon aus, dass zur Berechnung der Fehlermaße $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{L}^2}$, $\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_E$ und $|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h|_E$ die Integration über das mit dem Kontinuum assoziierte Gebiet Ω exakt ausgeführt wurde. Im Rahmen des in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommenden isoparametrischen Elementkonzepts ist dies allerdings nur für

²⁰Aufgrund der dem Operator $a(\cdot, \cdot)$ anhaftenden Eigenschaften der Symmetrie und Bilinearität gilt:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = a(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h) + 2a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h) + a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u} - \mathbf{u}^h) \quad (\text{B.56})$$

Weiterhin sei angenommen, dass sämtliche wesentlichen Randbedingungen auf Γ_u^h verschwinden (homogene Verschiebungsrandbedingungen). Die hierdurch induzierte Identität der Funktionsräume $\hat{\mathcal{S}}_u^h = \hat{\mathcal{V}}_u^h$ überführt wegen $a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h) = 0$, vgl. Gl. (B.46)₁, Gl. (B.56) in den Ausdruck

$$a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u} - \mathbf{u}^h) = a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - a(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h). \quad (\text{B.57})$$

Damit kann in Gl. (B.55) für den angegebenen Spezialfall das Approximations- durch ein Gleichheitszeichen ersetzt werden. Es resultiert

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_E = \sqrt{|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h|_E}, \quad \text{mit} \quad |\mathbf{u} - \mathbf{u}^h|_E := \frac{1}{2}(a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - a(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h)) = \psi(\mathbf{E}_L) - \psi(\mathbf{E}_L^h).$$

Eine andere direkte Konsequenz der Beziehung (B.57) ist infolge $a(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h, \mathbf{u} - \mathbf{u}^h) \geq 0$ die Ungleichung

$$a(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h) \leq a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \quad \text{bzw.} \quad \psi(\mathbf{E}_L^h) \leq \psi(\mathbf{E}_L),$$

welche eine Unterschätzung der mit der FE-Approximation \mathbf{u}^h assoziierten Formänderungsenergie $\psi(\mathbf{E}_L^h) = 1/2a(\mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h)$ ausdrückt. Es sei noch einmal explizit angemerkt, dass diese vielfach zitierte obere energetische Schranke der exakten Lösung, konkretisiert durch $\psi(\mathbf{E}_L) = 1/2a(\mathbf{u}, \mathbf{u})$, nur bei elastischen Problemen mit homogenen Verschiebungsrandbedingungen vorliegt. Dagegen ist die sich von oben asymptotisch annähernde Beziehung $\pi_u(\mathbf{u}^h) \geq \pi_u(\mathbf{u})$ bei Existenz einer potentiellen Energie (Gesamtpotential) π_u allgemeingültig, siehe hierzu [Hughes, 2000] für weitere Details.

einfachste geometrische Konfigurationen, wie z. B. für Rechteckgebiete im \mathbb{R}^2 , realisierbar. In der Regel müssen die Berechnungsvorschriften (B.52), (B.54), und (B.55)₂ numerisch integriert werden. Aus Sicht des Autors der vorliegenden Monographie existieren hierfür prinzipiell zwei verschiedene Möglichkeiten.

Im Rahmen der ersten Berechnungsalternative (Berechnungskonzept I) wird die Quadratur über das der Diskretisierung \mathcal{I}_h zugeordnete Rechengebiet Ω^h durchgeführt, siehe Abb. B.2. In vollständiger Analogie zu Abschnitt 5.1 liefert die Anwendung eines

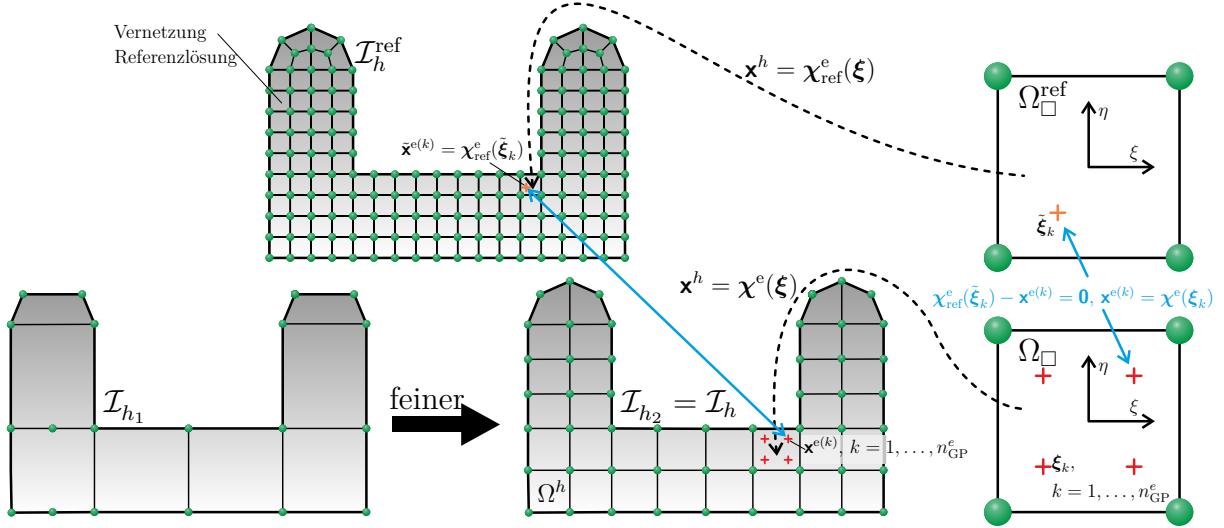


Abbildung B.2: Schematische Illustration des Berechnungskonzepts I zur Auswertung des Raumdiskretisierungsfehlers - Strategie zur Projektion der Quadraturpunkte von \mathcal{I}_h auf die der numerischen Referenzlösung zugeordnete räumliche Diskretisierung

numerischen Quadratureschemas mit n_{GP}^e Integrationspunkten,²¹ siehe auch Abschnitt B.2, unter Berücksichtigung der Definition (B.44)₂ die Ausdrücke

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{L}^2} \approx \sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \left\{ \mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \hat{\mathbf{u}}^{e(k)} \right\}^T \left\{ \mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \hat{\mathbf{u}}^{e(k)} \right\} \det \mathbf{j}^{e(k)} \quad (\text{B.58})$$

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\text{E}} \approx \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \left\{ \mathbf{E}_{\text{L}}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \mathbf{E}_{\text{L}}^{e(k)} \right\}^T \mathbf{h}^e(\mathbf{E}_{\text{L}}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \mathbf{E}_{\text{L}}^{e(k)}) \det \mathbf{j}^{e(k)}, \quad (\text{B.59})$$

und

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h|_{\text{E}} \approx \frac{1}{2} \left| a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - \left(\sum_{e=1}^{n^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GP}}^e} w_k \mathbf{E}_{\text{L}}^{e(k)T} \mathbf{h}^e(\mathbf{E}_{\text{L}}^{e(k)}) \det \mathbf{j}^{e(k)} \right) \right|, \quad (\text{B.60})$$

mit der punktuell ausgewerteten elastischen Spannungsantwort $\mathbf{T}^{e(k)} = \mathbf{h}^e(\mathbf{E}_{\text{L}}^{e(k)})$. Es sei an dieser Stelle explizit hervorgehoben, dass sich die Berechnungsvorschriften (B.58)

²¹Hierbei ist darauf zu achten, dass eine ausreichende Integrationsordnung, also eine adäquate Anzahl von Integrationspunkten, gewählt wird.

bis (B.60) auf die Diskretisierung \mathcal{I}_h beziehen. Zugunsten einer verkürzten Notation wird diese Information jedoch nicht mitgeführt. Die Bilinearform der exakten Lösung $a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = 2\psi(\mathbf{E}_L)$, siehe Gl. (B.60), ist bei Kenntnis der analytischen Lösung \mathbf{u} a priori determinierbar und repräsentiert aus diesem Grund einen bekannten Funktionswert. Des Weiteren symbolisieren in den angegebenen Beziehungen (B.58) bis (B.60) $\mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}}$ und $\mathbf{E}_L|_{\mathbf{x}^{e(k)}}$ die am Gauß-Punkt $\boldsymbol{\xi}_k$, $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, mit der globalen Koordinate $\mathbf{x}^{e(k)} = \boldsymbol{\chi}^e(\boldsymbol{\xi}_k)$, ausgewertete analytische Verschiebungs- und Verzerrungslösung sowie $\hat{\mathbf{u}}^{e(k)} = \mathbf{N}_u^e \mathbf{u}^e$ das im Element e , $e = 1, \dots, n^e$, an der Stelle $\boldsymbol{\xi}_k$, $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, interpolierte Verschiebungsfeld.²² Die restlichen Größen in den Integranden kennzeichnen die Wichtungsfaktoren w_k , $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, sowie die am Integrationspunkt $\boldsymbol{\xi}_k$, $k = 1, \dots, n_{\text{GP}}^e$, ermittelte Determinante der Jacobi-Matrix $\det \mathbf{j}^{e(k)} = \det \mathbf{j}^e(\boldsymbol{\xi}_k)$. Die Jacobi-Matrix, als Gradient der Koordinatentransformation $\mathbf{x}^h = \boldsymbol{\chi}^e(\boldsymbol{\xi})$, ist durch den Ausdruck $\mathbf{j}^e = \text{grad}_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\chi}^e(\boldsymbol{\xi})$ definiert. Darüber hinaus liegt die Lösung eines allgemeinen Problems der Elastizitätstheorie nur in wenigen Sonderfällen in analytischer Form vor, sodass häufig auf eine hochgenaue numerische Referenzlösung $\mathbf{u}_{\text{ref}}^h$ als Ersatz für \mathbf{u} zurückgegriffen werden muss. Die Auswertung von $\mathbf{u}_{\text{ref}}^h$ erfolgt auf dem Netz $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$, dessen charakteristische Elementlänge h^{ref} sich durch die Eigenschaft $h^{\text{ref}} \ll h$ auszeichnet. Auf Basis dieser die analytische Lösung imitierenden hochgenauen FE-Approximation gelingt es, durch abermaliges Anwenden einer numerischen Quadratur die folgende Schätzung für $a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = 2\psi(\mathbf{E}_L)$ zu generieren:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \approx a(\mathbf{u}_{\text{ref}}^h, \mathbf{u}_{\text{ref}}^h) = \sum_{e=1}^{n_{\text{ref}}^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GPref}}^e} w_k \mathbf{E}_L^{e(k)\text{T}} \Big|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \mathbf{h}^e \left(\mathbf{E}_L^{e(k)} \Big|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \right) \det \mathbf{j}^{e(k)} \Big|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \quad (\text{B.61})$$

Diesmal allerdings beziehen sich die Diskretisierungsparameter n_{ref}^e , n_{GPref}^e und w_k , $k = 1, \dots, n_{\text{GPref}}^e$, sowie sämtliche Funktionsauswertungen $(\cdot)|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}}$ auf die räumliche Parametrisierung $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$. Um bei Abwesenheit einer analytischen Lösung die Größen $\mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}}$ und $\mathbf{E}_L|_{\mathbf{x}^{e(k)}}$ an der Position $\mathbf{x}^{e(k)} = \boldsymbol{\chi}^e(\boldsymbol{\xi}_k)$ von \mathcal{I}_h zu reproduzieren, ist ein aufwendigeres Vorgehen erforderlich. In der vorliegenden Arbeit wird hierfür eine simple Projektionsstrategie verfolgt, bei dem jeder innerhalb der Quadratur von Gl. (B.58) bzw. Gl. (B.59) abgefragte Integrationspunkt $\mathbf{x}^{e(k)} = \boldsymbol{\chi}^e(\boldsymbol{\xi}_k)$ von \mathcal{I}_h eine entsprechende Projektionskoordinate $\tilde{\mathbf{x}}^{e(k)} = \boldsymbol{\chi}_{\text{ref}}^e(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k)$ auf der Vernetzung $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$ zugewiesen bekommt.²³ Durch Interpolation des Verschiebungs- bzw. Verzerrungsfeldes mit Hilfe der auf $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$ definierten und an der Position $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k = \boldsymbol{\phi}_{\text{ref}}^e(\tilde{\mathbf{x}}^{e(k)})$, mit $\boldsymbol{\phi}_{\text{ref}}^e = \{\boldsymbol{\chi}_{\text{ref}}^e\}^{-1}$, ausgewerteten Ansatzfunktionen lassen sich dann die entsprechenden Näherungen

$$\mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} \approx \hat{\mathbf{u}}_{\text{ref}}^e|_{\tilde{\mathbf{x}}^{e(k)}} = \mathbf{N}_u^e(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k) \Big|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \mathbf{u}_{\text{ref}}^e \quad \text{und} \quad \mathbf{E}_L|_{\mathbf{x}^{e(k)}} \approx \mathbf{E}_{L\text{ref}}^e|_{\tilde{\mathbf{x}}^{e(k)}} = \mathbf{B}_u^e(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k) \Big|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \mathbf{u}_{\text{ref}}^e \quad (\text{B.62})$$

angeben. Die gesamte Prozedur veranschaulicht Abb. B.2 schematisch.

²²In Abhängigkeit der verwendeten Interpolationsordnung für die zugrunde liegende Diskretisierung empfiehlt es sich, zur Auswertung von Gl. (B.58) eine höhere Genauigkeitsordnung in der Quadratur als zur numerischen Integration der Energienorm (B.59) heranzuziehen.

²³Bei genauerer Betrachtung der applizierten Strategie ist zu konstatieren, dass im eigentlichen Sinne nicht die globale Projektionskoordinate $\tilde{\mathbf{x}}^{e(k)}$, sondern die einem Element von $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$ zugeordnete lokale Koordinate $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k$, die gesuchte Größe repräsentiert. Letztere wird durch Lösung des impliziten Ausdrucks $\boldsymbol{\chi}_{\text{ref}}^e(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k) - \mathbf{x}^{e(k)} = \mathbf{0}$ ermittelt.

Das zweite Berechnungskonzept (Berechnungskonzept II) führt zur Konstruktion der Fehlermaße (B.52), (B.54), und (B.55)₂ die Quadratur auf dem Rechengebiet Ω_{wd}^h einer fixierten Bezugsdiskretisierung $\mathcal{I}_h^{\text{wd}}$ (Hintergrundnetz), mit n_{wd}^e Elementen, durch, siehe Abb. B.3. Nach Applikation eines geeigneten Quadratschemas, dessen n_{GPwd}^e Integrati-

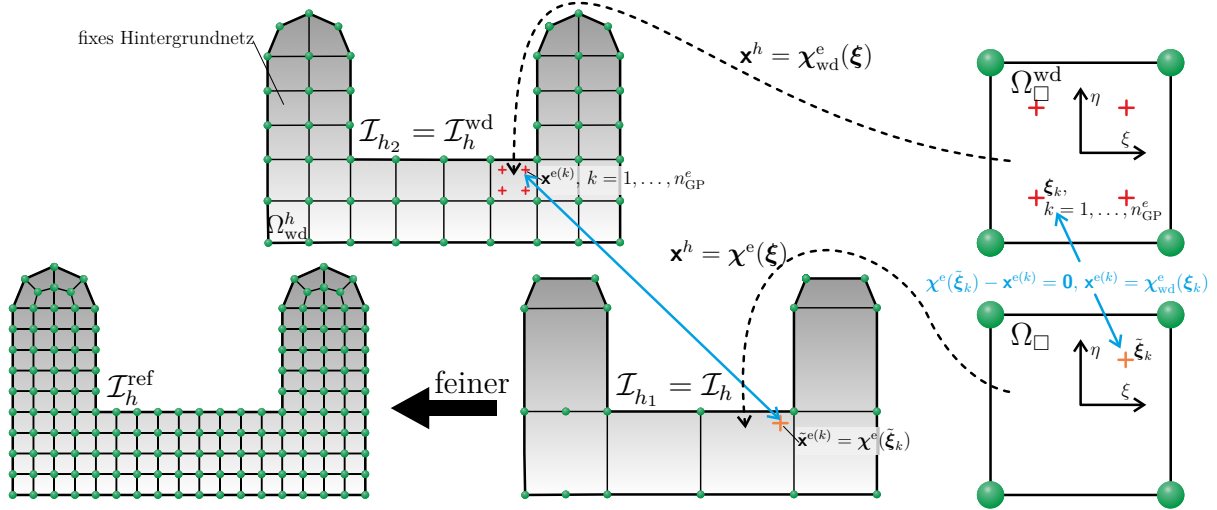


Abbildung B.3: Schematische Illustration des Berechnungskonzepts II zur Auswertung des Raumdiskretisierungsfehlers - Strategie zur Projektion der Quadraturpunkte des fixierten Hintergrundnetzes $\mathcal{I}_h^{\text{wd}}$ auf die der Vernetzung \mathcal{I}_h zugeordnete räumliche Diskretisierung

onspunkte innerhalb eines Kontinuumselements im physikalischen Raum an der Position $\mathbf{x}^{e(k)} = \chi_{\text{wd}}^e(\xi_k)$ lokalisierbar sind, resultieren die Berechnungsvorschriften

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\mathcal{L}^2} \approx \sum_{e=1}^{n_{\text{wd}}^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GPwd}}^e} w_k \left\{ \mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \hat{\mathbf{u}}^e|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}} \right\}^T \left\{ \mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \hat{\mathbf{u}}^e|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}} \right\} \det \mathbf{j}^{e(k)} \quad (\text{B.63})$$

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h\|_{\text{E}} \approx \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{n_{\text{wd}}^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GPwd}}^e} w_k \left\{ \mathbf{E}_{\text{L}}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \mathbf{E}_{\text{L}}^e|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}} \right\}^T \mathbf{h}^e(\mathbf{E}_{\text{L}}|_{\mathbf{x}^{e(k)}} - \mathbf{E}_{\text{L}}^e|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}}) \det \mathbf{j}^{e(k)}, \quad (\text{B.64})$$

und

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}^h|_{\text{E}} \approx \frac{1}{2} \left| a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - \left(\sum_{e=1}^{n_{\text{wd}}^e} \sum_{k=1}^{n_{\text{GPwd}}^e} w_k \mathbf{E}_{\text{L}}^{\text{eT}}|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}} \mathbf{h}^e(\mathbf{E}_{\text{L}}^e|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}}) \det \mathbf{j}^{e(k)} \right) \right|. \quad (\text{B.65})$$

Hierbei werden die Ausdrücke (B.63) bis (B.65) zunächst unter Berücksichtigung der Präsenz einer analytischen Lösung \mathbf{u} formuliert. Um die dem jeweiligen Netzentwurf \mathcal{I}_h zugeordneten Funktionsauswertungen

$$\hat{\mathbf{u}}^e|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}} = \mathbf{N}_{\text{u}}^e(\hat{\xi}_k) \Big|_{\mathcal{I}_h} \mathbf{u}^e \quad \text{und} \quad \mathbf{E}_{\text{L}}^e|_{\hat{\mathbf{x}}^{e(k)}} = \mathbf{B}_{\text{u}}^e(\hat{\xi}_k) \Big|_{\mathcal{I}_h} \mathbf{u}^e \quad (\text{B.66})$$

zu generieren, müssen im Gegensatz zum vorhergehend erörterten Berechnungskonzept (Berechnungskonzept I) sämtliche Quadraturpunkte $\mathbf{x}^{e(k)} = \chi_{\text{wd}}^e(\xi_k)$ von $\mathcal{I}_h^{\text{wd}}$ in korrespondierende Positionen $\hat{\mathbf{x}}^{e(k)} = \chi^e(\hat{\xi}_k)$ auf \mathcal{I}_h abgebildet werden, siehe Abb. B.3. Hierzu kommen erneut unter Vertauschung der Transformationsrollen die zuvor erläuterte Projektions- und Interpolationsstrategie zum Einsatz. Für das allgemeinere Szenario, dass keine analytische Lösung \mathbf{u} verfügbar ist, lassen sich $a(\mathbf{u}, \mathbf{u})$, $\mathbf{u}|_{\mathbf{x}^{e(k)}}$ und $\mathbf{E}_L|_{\mathbf{x}^{e(k)}}$ durch die bereits spezifizierten Beziehungen (B.62), (B.61)₁ und (B.61)₂ unter Berücksichtigung der abgeänderten Integrationspunkte $\mathbf{x}^{e(k)} = \chi_{\text{wd}}^e(\xi_k)$ auf $\mathcal{I}_h^{\text{wd}}$ imitieren. Damit das in Abb. B.3 visualisierte Berechnungskonzept zur Durchführung einer Raumkonvergenzanalyse herangezogen werden kann, sollte außerdem das Hintergrundnetz über eine ausreichende Anzahl von Datenpunkten verfügen. Die Voraussetzung stellt sicher, dass sämtliche Bereiche auch Gebiete mit hohen Verzerrungs- und Spannungskonzentrationen, also Gebiete mit einer hohen Fehlerdichte, in die Auswertung einbezogen werden.

Zur Demonstration der Gültigkeit der angegebenen Konvergenzeigenschaften für die in dieser Arbeit behandelte h-Version der Finite-Elemente-Methode soll das zweidimensionale Beispiel aus Abb. B.4a mit den zuvor erörterten Berechnungskonzepten eingehender analysiert werden. Der Fokus der nachfolgenden Ausführungen liegt da-

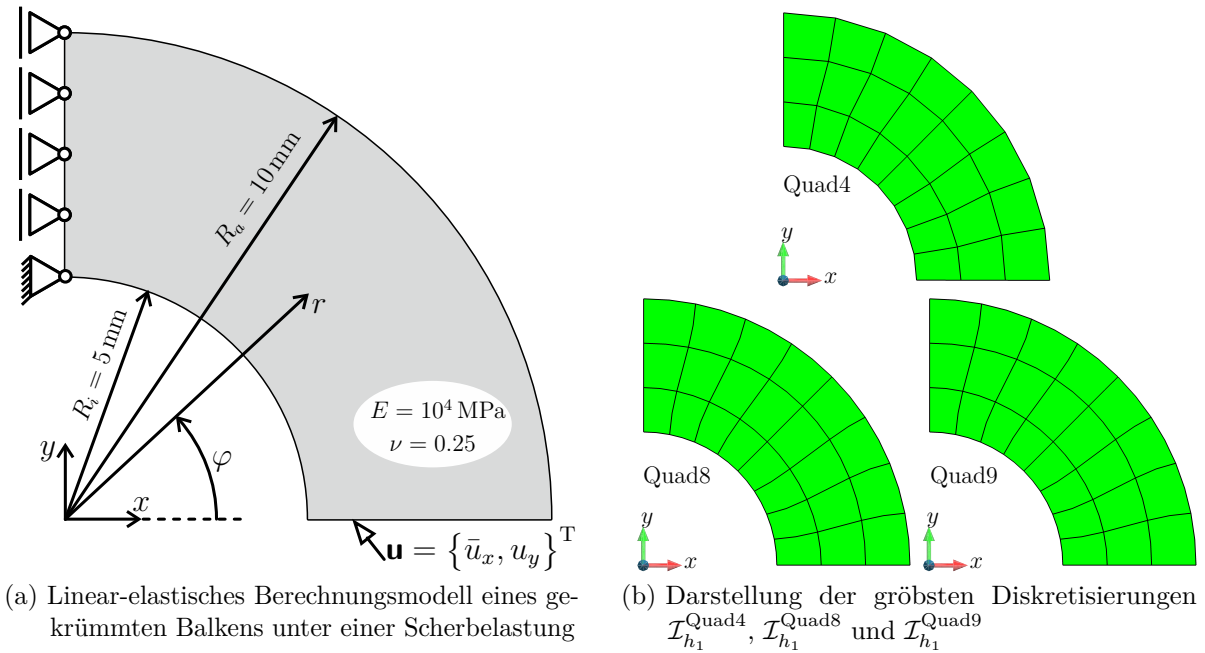


Abbildung B.4: Raumkonvergenzstudie - Spezifikation des mathematischen Modells und Visualisierung der Startdiskretisierungen für die sukzessive verfeinernden Vernetzungssequenzen

bei auf der Erläuterung des Auswertungsprozesses für die verschiedenen Fehlermaße des Raumdiskretisierungsfehlers und deren numerische Umsetzung. Die aus [Zienkiewicz et al., 2013, S. 239–242] übernommene quasistatische Randwertaufgabe besteht aus einem kreisförmigen Balken, mit dem Innenradius $R_i = 5 \text{ mm}$ und dem Außenradius $R_a = 10 \text{ mm}$, siehe Abb. B.4a. Unter Ausnutzung von Symmetrierandbedingungen

entlang der y -Achse wird nur die halbe Struktur modelliert. Als Belastung wirkt eine Verschiebung $\bar{u}_x = u_0 = -0.01$ mm in horizontaler Richtung (x -Richtung) am unteren Ende des Balkens. Da an der benannten Position die vertikalen Verschiebungsfreiheitsgrade nicht gesperrt sind, wird zum Ausschluss einer Starrkörperbewegung in y -Richtung die Struktur im Punkt $x = 0$, $y = R_i$, vollständig fixiert. Das Strukturverhalten des kinematisch linearen Berechnungsmodells aus Abb. B.4a folgt dem Hookeschen Gesetz, mit den Materialkennwerten $E = 10^4$ MPa und $\nu = 0.25$. Um der ebenen Problemstellung Rechnung zu tragen, komplettiert die Annahme eines ebenen Spannungszustands die Definition des mathematischen Modells.

Wie u. a. Zienkiewicz et al. [2013, S. 239–242] zu entnehmen ist, existiert für die beschriebene Randwertaufgabe eine exakte analytische Lösung. Die Lösung der zugrunde liegenden Laméschen Gleichungen (Verschiebungsdifferentialgleichungen) wird auf Basis der Airyschen Spannungsfunktion konstruiert, siehe auch [Timoschenko und Goodier, 1970]. In Bezug auf das in Abb. B.4a dargestellte Polarkoordinatensystem, mit den Koordinaten r und φ sowie den hiervon abgeleiteten Basisvektoren \mathbf{e}_r und \mathbf{e}_φ , ist die analytische Vergleichslösung $\mathbf{u} = u_r \mathbf{e}_r + u_\varphi \mathbf{e}_\varphi$ durch die Ausdrücke

$$\begin{aligned} u_r &= -\frac{u_0}{\pi(R_i^2 + R_a^2)} \left(\left(\frac{1}{2}(1 - 3\nu)r^2 - \frac{R_i^2 R_a^2(1 + \nu)}{2r^2} - (R_i^2 + R_a^2)(1 - \nu) \ln(r/r_0) \right) \sin \varphi \right. \\ &\quad \left. + (R_i^2 + R_a^2)(2\varphi - \pi) \cos \varphi \right) - K \sin \varphi, \\ u_\varphi &= \frac{u_0}{\pi(R_i^2 + R_a^2)} \left(\left(\frac{1}{2}(5 + \nu)r^2 - \frac{R_i^2 R_a^2(1 + \nu)}{2r^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (R_i^2 + R_a^2)((1 - \nu) \ln(r/r_0) + (1 + \nu)) \right) \cos \varphi \right. \\ &\quad \left. + (R_i^2 + R_a^2)(2\varphi - \pi) \sin \varphi \right) - K \cos \varphi, \end{aligned} \tag{B.67}$$

mit

$$K = -\frac{u_0}{\pi(R_i^2 + R_a^2)} \left(\frac{1}{2}(1 - 3\nu)R_i^2 - \frac{1}{2}(1 + \nu)R_a^2 - (R_i^2 + R_a^2)(1 - \nu) \ln(R_i/r_0) \right)$$

und der dimensionsbehafteten Konstante $r_0 = 1$ mm, gegeben. Die analytische Lösung wird im Folgenden zur Durchführung der angekündigten Raumkonvergenzstudie herangezogen. Zur Diskretisierung des mit dem Kreisringsektor assoziierten Kontinuums finden 4-knotige lineare (Quad4), 8-knotige quadratische (Quad8) oder 9-knotige quadratische Viereck-Elementen (Quad9) Anwendung. Insgesamt werden für die folgende Konvergenzanalyse acht verschiedene Vernetzungsgrade gewählt, die in den sukzessive verfeinernden Netzsequenzen $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad4}}$, $k = 1, \dots, 8$, $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad8}}$, $k = 1, \dots, 8$, bzw. $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad9}}$, $k = 1, \dots, 8$, münden. Der Vernetzungsgrad, ausgedrückt mit Hilfe einer charakteristischen Elementlänge h , variiert dabei in den Grenzen $h = 2.26$ mm bis $h = 1.93 \times 10^{-2}$ mm. Die oberste Bildreihe in den Abb. B.5 bis B.7 illustriert exemplarisch für $k = 1, \dots, 3$ die Abstufungen in dem Diskretisierungsparameter h . Der jeweils für die analysierten Elementtypen zum Einsatz kommende größte Netzentwurf ist auch Abb. B.4b zu entnehmen. Obwohl die gezeigten Gebietszerlegungen geometrischen Verzerrungen an den Berandungen, welche

im mathematischen Modell, siehe Abb. B.4a, nicht präsent sind, sowie im gesamten Kontinuumsbereich Verzerrungen im Gestaltverhältnis unterliegen, kann dennoch in guter Näherung von regulären (einheitlichen) Vernetzungen bzw. regulären Vernetzungssequenzen ausgegangen werden.²⁴ Diese $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad4}}$, $k = 1, \dots, 8$, $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad8}}$, $k = 1, \dots, 8$, bzw. $\mathcal{I}_{h_k}^{\text{Quad9}}$, $k = 1, \dots, 8$, zugesprochene Eigenschaft, also die Annahme der Gleichmäßigkeit bzw. Einheitlichkeit einer Folge von räumlichen Diskretisierungen, stellt die Grundvoraussetzung für die Gegenüberstellung mit den oben getroffenen klassischen Konvergenzaussagen dar. Zur Charakterisierung der Vorhersagefähigkeit der einzelnen Vernetzungssequenzen sind in den Abb. B.5 bis B.7 die resultierenden von Mises Spannungsverteilungen zusammen mit der für die jeweilige Gebietszerlegung aufgewendeten Anzahl von Verschiebungsfreiheitsgraden n_{ua} gegenübergestellt. Die Resultate der mit dem Berechnungskonzept I durchgeführten Raumkonvergenzstudie sind Abb. B.8 zu entnehmen, wobei sowohl die analytische Vergleichslösung $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$ („ref. analytic“) aus Gl. (B.67) als auch eine auf $\mathcal{I}_h^{\text{ref}} = \mathcal{I}_{h_8}^{\text{Quad8}}$ generierte numerische Referenzlösung $\mathbf{u}_{\text{ref}}^h \in \mathbb{R}^2$ („ref. numeric“) zur Auswertung herangezogen werden. Zur Vereinheitlichung des Begriffsapparats sollen im Folgenden beide Varianten einer Referenzlösung in Abb. B.8 als $\mathbf{u}_{\text{ref}} \in \mathbb{R}^2$ Erwähnung finden. Außerdem werden zur Entdimensionierung sämtliche Fehlermaße auf die mit einer konformen Norm generierten skalaren Maße $\|\mathbf{u}_{\text{ref}}\|_{\mathcal{L}^2}$, $\|\mathbf{u}_{\text{ref}}\|_{\text{E}}$, $\psi_{\text{ref}} = 1/2a(\mathbf{u}_{\text{ref}}, \mathbf{u}_{\text{ref}})$ und $\|\tilde{\mathbf{u}}_{\text{a}}|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}}\|$ der Referenzlösung \mathbf{u}_{ref} bezogen. Bei der Interpretation der Verläufe der Konvergenzgraphen B.8a bis B.8c, wobei zunächst auf Elemente mit linearer Interpolationsordnung (Quad4) Bezug genommen wird, ist zu erkennen, dass diese mit den zu Beginn dieses Abschnitts angegebenen a priori Abschätzungen exakt übereinstimmen. Die Analyse auf die quadratischen Elemente (Quad8 und Quad9) gerichtet, offenbart ebenfalls eine hervorragende Affinität mit der Theorie. Lediglich in Abb. B.8c ist bei Verwendung der analytischen Vergleichslösung für kleine charakteristische Elementlängen ein Stagnieren der Konvergenz zu beobachten. Den in Bezug auf eine Euklidische Vektornorm gemessenen Raumdiskretisierungsfehler illustriert Abb. B.8d. Hierbei wird trivialerweise die Euklidische Vektornorm der Differenz zwischen dem globalen Knotenverschiebungsvektor $\mathbf{u}_{\text{a}}|_{\mathcal{I}_h} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}}$, welcher aus einer Assemblierung aller Verschiebungsfreiheitsgrade auf \mathcal{I}_h hervorgeht, und einem von $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$ auf den jeweiligen Netzentwurf \mathcal{I}_h projizierten Verschiebungsvektor $\tilde{\mathbf{u}}_{\text{a}}|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}}$ gebildet.²⁵ Es ist offensichtlich, dass die Elementtypen mit linearen und quadratischen Ansatzfunktionen unterschiedliche Neigungen in den Kurvenverläufen von Abb. B.8d aufweisen. Darüber hinaus ist die Fehlerkonstante von Elementen mit einer quadratischen Interpolationsordnung deutlich kleiner als die der 4-knotigen linearen Viereck-Elemente. Weiterführende Interpretationen für die Konvergenzgraphen aus Abb. B.8d sind allerdings nicht ableitbar, da nach Kenntnisstand des Autors der vorliegenden Monographie theoretische Konvergenzabschätzungen für einen in der Euklidischen Vektornorm angegebenen Raumdiskretisierungsfehler nicht existieren.

²⁴Für weiterführende Details zur Quantifizierung der Einheitlichkeit von Vernetzungsfolgen sei auf [Hughes, 2000] referiert.

²⁵Zum Aufstellen von $\tilde{\mathbf{u}}_{\text{a}}|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}}$ wird die in Abb. B.2 veranschaulichte Projektionsstrategie auf sämtliche Knotenpositionen von \mathcal{I}_h angewendet. Nach Bestimmung sämtlicher Projektionspunkte auf der Zieldiskretisierung $\mathcal{I}_h^{\text{ref}}$ werden die an den zugehörigen lokalen Koordinaten interpolierten Verschiebungswerte in den diskreten Knotenverschiebungsvektor $\tilde{\mathbf{u}}_{\text{a}}|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}}$ einsortiert.

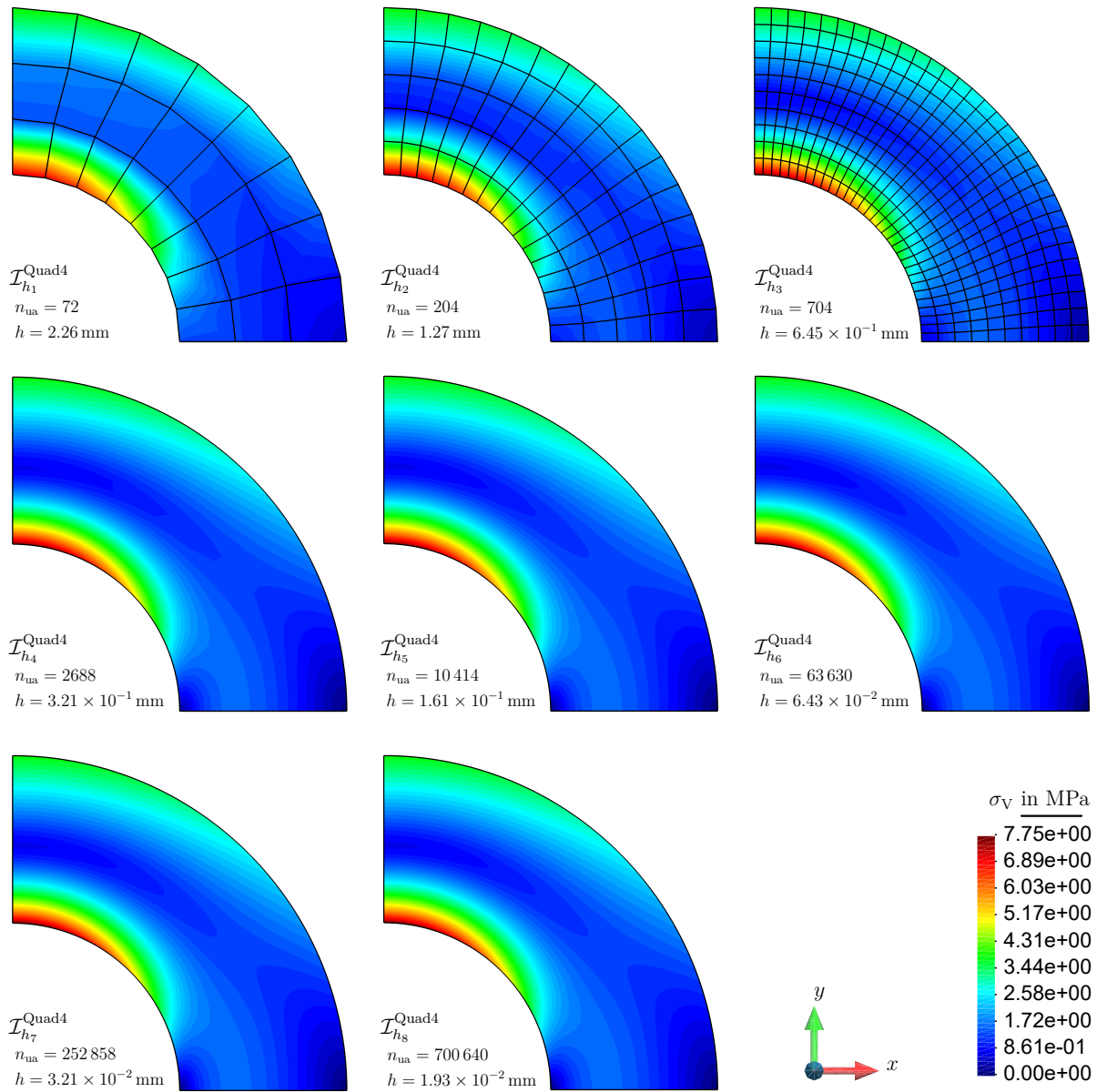


Abbildung B.5: Konturgraphen der von Mises Spannungsverteilung für eine sukzessive verfeinernde Sequenz von Vernetzungen, mit 4-knotigen linearen Viereck-Elementen (Quad4)

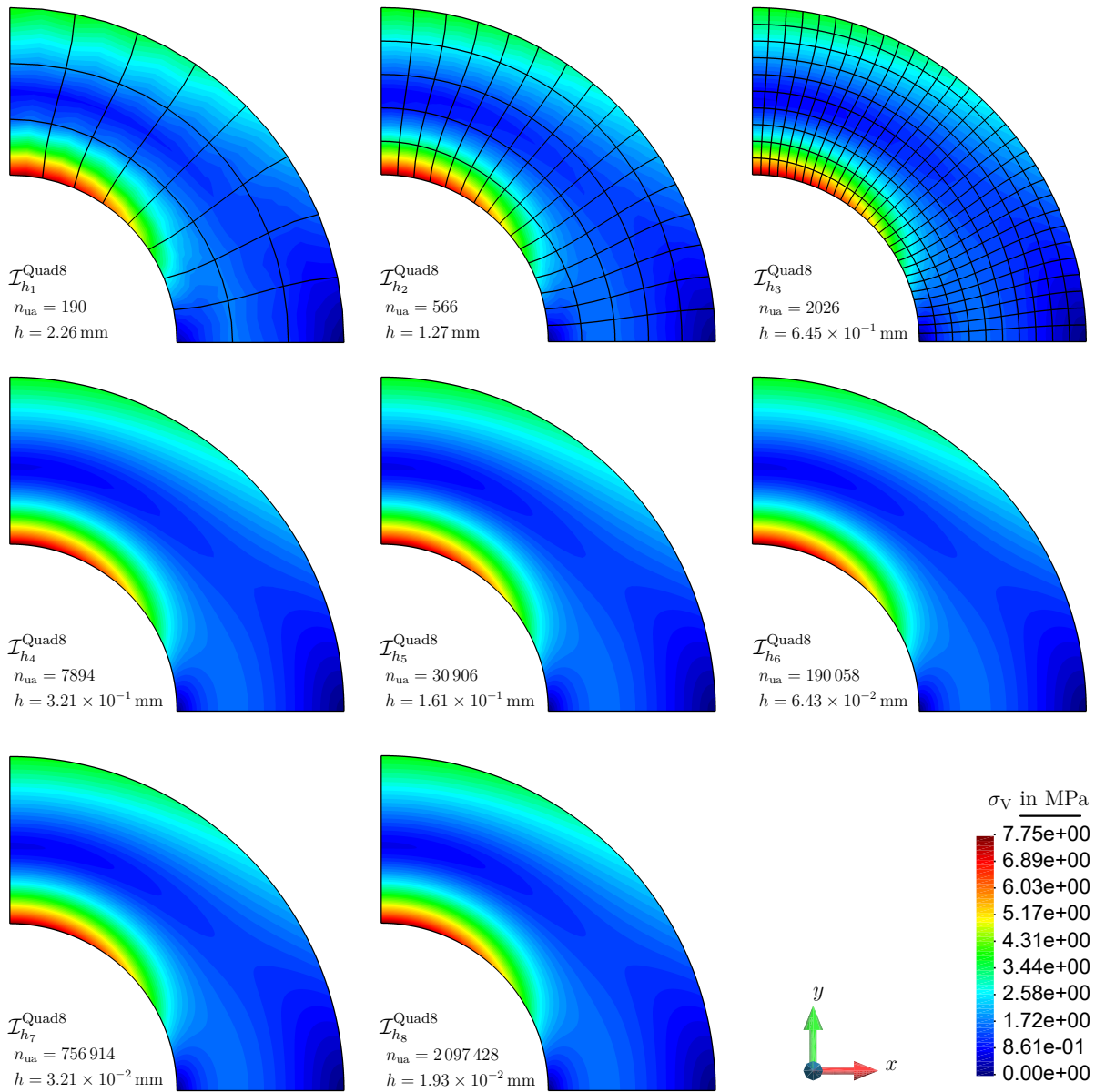


Abbildung B.6: Konturgraphen der von Mises Spannungsverteilung für eine sukzessive verfeinernde Sequenz von Vernetzungen, mit 8-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad8)

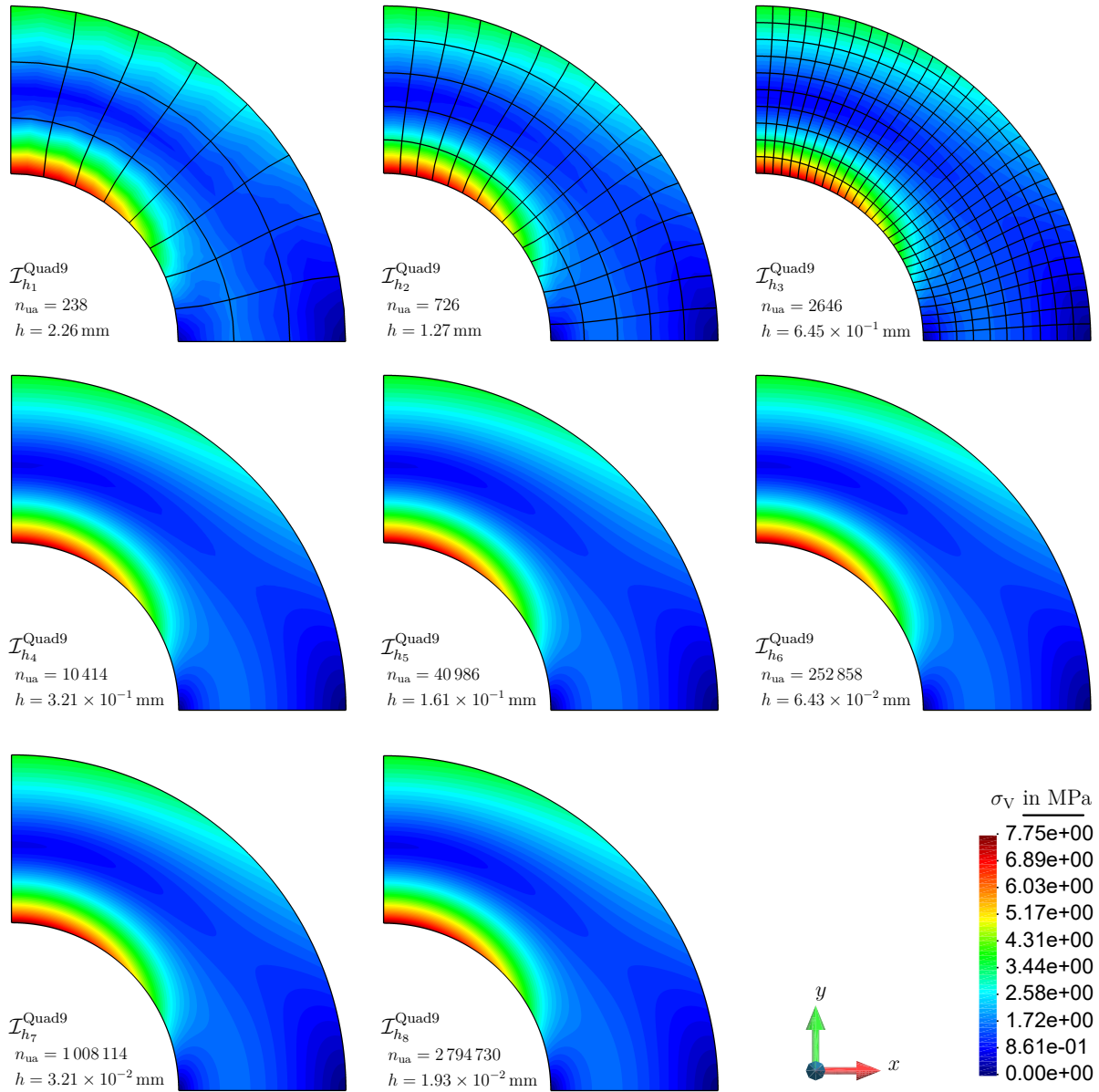
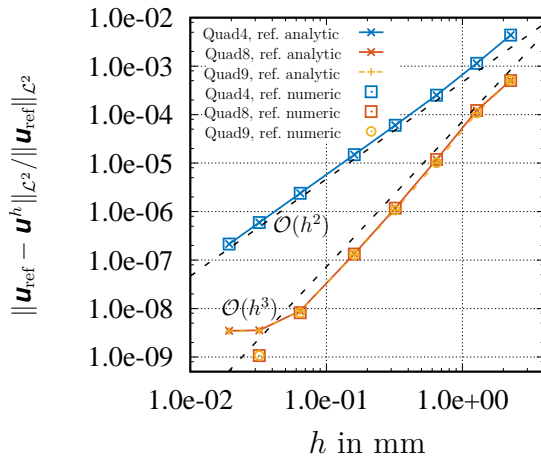
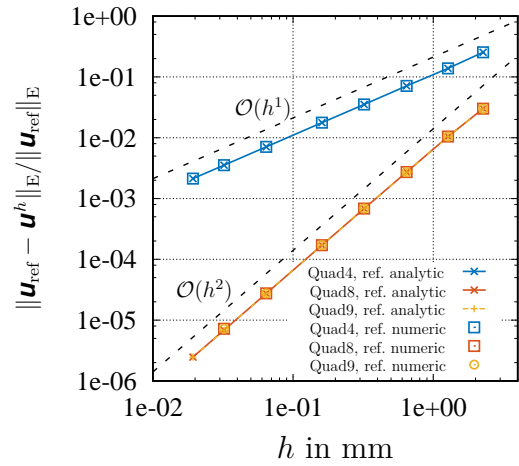
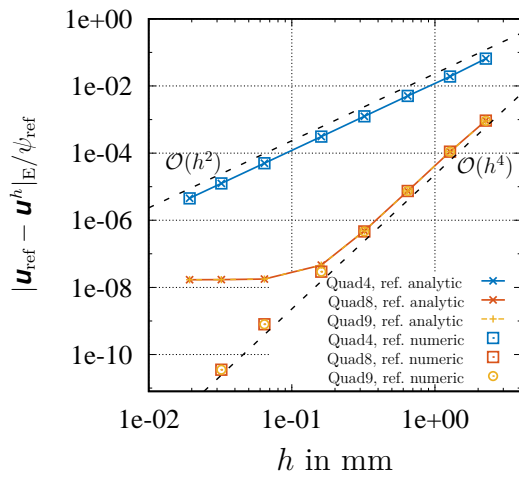


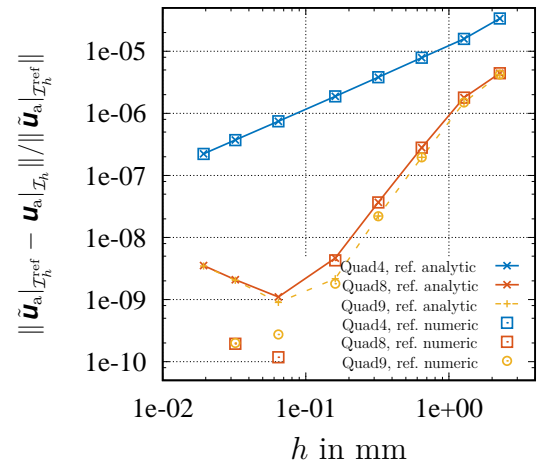
Abbildung B.7: Konturgraphen der von Mises Spannungsverteilung für eine sukzessive verfeinernde Sequenz von Vernetzungen, mit 9-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad9)


 (a) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler in der L^2 -Norm


(b) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler in der Energienorm



(c) Konvergenz der Formänderungsenergie



(d) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler, ausgedrückt mit der Euklidischen Vektornorm

Abbildung B.8: Konvergenzanalyse zum Raumdiskretisierungsfehler des Verschiebungsfelds bei gleichmäßiger Netzverfeinerung für Diskretisierungen mit 4-knotigen linearen (Quad4), 8-knotigen quadratischen (Quad8) oder 9-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad9), ausgewertet mit dem Berechnungskonzept I auf Grundlage einer analytischen bzw. numerischen Referenzlösung

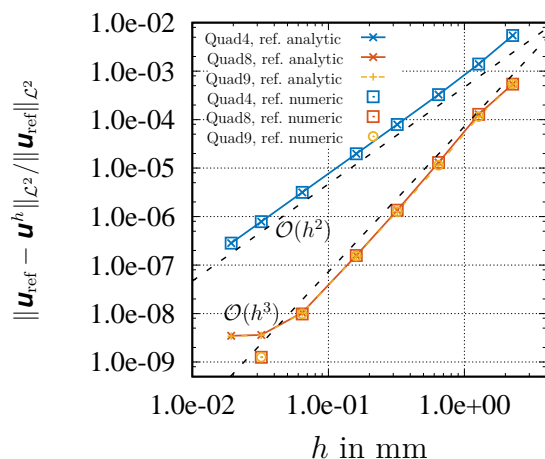
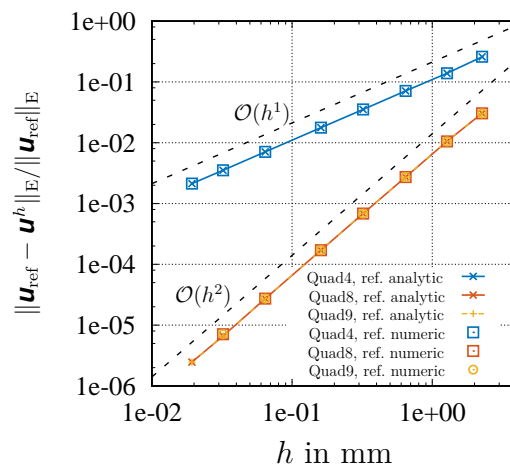
Eine alternative Auswertungsmöglichkeit zur Abschätzung des Raumdiskretisierungsfehlers stellt die Anwendung des Berechnungskonzepts II dar. Die Wahl des fixen Hintergrundnetzes $\mathcal{I}_h^{\text{wd}}$ fällt dabei auf die der numerischen Referenzlösung zugeordnete räumliche Diskretisierung $\mathcal{I}_h^{\text{ref}} = \mathcal{I}_{h_8}^{\text{Quad8}}$, d. h. $\mathcal{I}_h^{\text{wd}} = \mathcal{I}_h^{\text{ref}} = \mathcal{I}_{h_8}^{\text{Quad8}}$. Abb. B.9 zeigt die zugehörigen Resultate der Raumkonvergenzstudie für das betrachtete Beispiel aus Abb. B.4, wobei erneut sowohl die analytische Vergleichslösung $\mathbf{u}_{\text{ref}} = \mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$ („ref. analytic“) aus Gl. (B.67) als auch eine auf $\mathcal{I}_h^{\text{ref}} = \mathcal{I}_{h_8}^{\text{Quad8}}$ generierte numerische Referenzlösung $\mathbf{u}_{\text{ref}} = \mathbf{u}_{\text{ref}}^h \in \mathbb{R}^2$ („ref. numeric“) zur Anwendung kommen. Die offensichtlich vorliegende Übereinstimmung mit der Theorie ist in den Abb. B.9a und B.9b unverkennbar. Auch die Fehleranalyse auf Basis der zweiten Berechnungsmethode weist in Abb. B.9c eine Stagnation des asymptotischen Konvergenzverhaltens für die quadratischen Elementtypen auf. Der Konvergenzgraph der 4-knotigen linearen Elemente erfüllt dagegen, bis auf den einzelnen Ausreißer, die an die numerische Methodik gestellten Erwartungen. Darüber hinaus lässt sich in Bezug auf Abb. B.9d konstatieren, dass das Berechnungskonzept II im Gegensatz zu dem auf Grundlage von Berechnungskonzept I erzeugten Konvergenzdiagramm B.8d stetigere Verläufe für die quadratischen Elementformen Quad8 und Quad9 generiert. An dieser Stelle sei außerdem explizit darauf aufmerksam gemacht, dass die Interpretationen des in den Abb. B.8d und B.9d aufgetragenen Fehlermaß voneinander abweichen. Infolge der Fixierung des Hintergrundnetzes werden im Rahmen des Berechnungskonzepts II nun sämtliche $\mathcal{I}_h^{\text{wd}} = \mathcal{I}_h^{\text{ref}}$ zugeordneten Verschiebungsfreiheitsgrade $\mathbf{u}_a|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}^{\text{ref}}}$ auf die einzelnen räumlichen Parametrisierungen \mathcal{I}_h projiziert. Aus der beschriebenen Prozedur geht der globale Vektor $\tilde{\mathbf{u}}_a|_{\mathcal{I}_h} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}^{\text{ref}}}$ hervor. Der Knotenverschiebungsvektor $\mathbf{u}_a|_{\mathcal{I}_h^{\text{ref}}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}^{\text{ref}}}$ resultiert aus der Auswertung der analytischen Vergleichslösung (B.67) an jedem Knoten von $\mathcal{I}_h^{\text{wd}} = \mathcal{I}_h^{\text{ref}}$.

Obwohl die in diesem Abschnitt erläuterten Konvergenzaussagen sowie die zur Auswertung des Raumdiskretisierungsfehlers herangezogenen Berechnungskonzepte nur für linear-elastische Problemstellungen wiedergegeben wurden, lassen sie sich ohne Komplikationen auch auf Elastizitätsprobleme für große Deformationen erweitern. Für weiterführende Details hierzu sei auf die Monographie von Wriggers [2008] referiert.

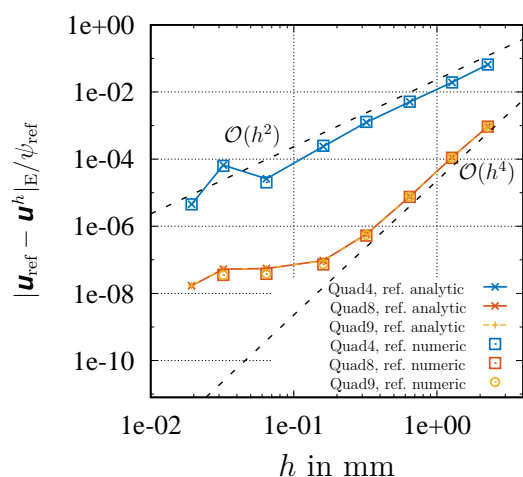
B.5 Einheitensystem

Im Rahmen einer leistungsfähigen FEM-Programmimplementation ist es üblich, auf eine Fixierung des Einheitensystems im Code zu verzichten. Dieses Merkmal zielt darauf ab, dem Anwender die Entscheidung über ein konsistentes Einheitensystem, z. B. zur Spezifizierung der Geometrieabmessungen oder der Materialparameter, zu überlassen. Das internationale Einheitensystem (SI) besteht aus den sieben Basiseinheiten: Länge (L) in m, Masse (M) in kg, Zeit (T) in Sekunden (s), thermodynamische Temperatur (Θ) in Kelvin (K), elektrische Stromstärke (I) in Ampere (A), Stoffmenge (N) in Mol (mol), Lichtstärke (J) in Candela (cd).

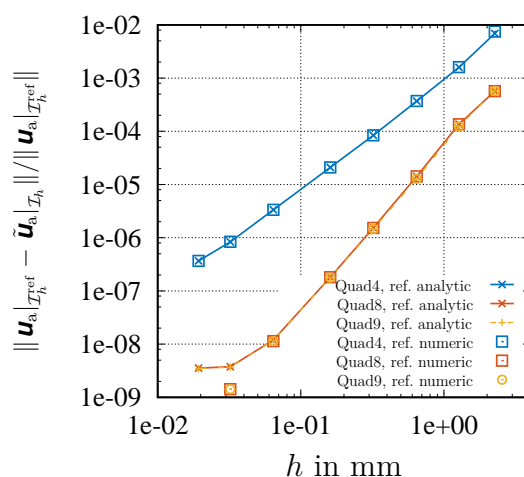
Alle anderen physikalischen Einheiten werden aus diesen Basiseinheiten abgeleitet. Im Rahmen der in der vorliegenden Arbeit durchgeführten thermomechanisch gekoppelten Berechnungen wird ein an das SI-Einheitensystem angelehntes Maßsystem verwendet, dessen Basiseinheiten Tab. B.2 auflistet.


 (a) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler in der L^2 -Norm


(b) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler in der Energienorm



(c) Konvergenz der Formänderungsenergie



(d) Gemessener Raumdiskretisierungsfehler, ausgedrückt mit der Euklidischen Vektornorm

Abbildung B.9: Konvergenzanalyse zum Raumdiskretisierungsfehler des Verschiebungsfelds bei gleichmäßiger Netzverfeinerung für Diskretisierungen mit 4-knotigen linearen (Quad4), 8-knotigen quadratischen (Quad8) oder 9-knotigen quadratischen Viereck-Elementen (Quad9), ausgewertet mit dem Berechnungskonzept II auf Grundlage einer analytischen bzw. numerischen Referenzlösung

Tabelle B.2: Zugehörige Basiseinheiten des in der vorliegenden Arbeit verwendeten Einheitensystems

Basisgröße	Dimensionssymbol	Einheit
Länge	L	mm
Masse	M	t
Zeit	T	s
Temperatur	Θ	K
Stromstärke	I	mA
Stoffmenge	N	mol
Lichtstärke	J	cd

C Mortar-basierte Finite-Elemente-Methode

C.1 Mortar-Segmentierung in 2D

Die Oberflächendiskretisierung der Kontaktschnittstelle mit 2-knotigen linearen oder 3-knotigen quadratischen Linien-Elementen (Lin2, Lin3) impliziert im \mathbb{R}^2 die folgenden Komponentendarstellungen der slave-seitigen Knotenvektoren

$$\mathbf{x}_a^{e(1)} = \begin{Bmatrix} x_a^{e(1)} \\ y_a^{e(1)} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{n}_a = \begin{Bmatrix} n_{xa} \\ n_{ya} \end{Bmatrix}, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)},$$

und des master-seitigen Spaltenvektors

$$\mathbf{x}_a^{e(2)} = \begin{Bmatrix} x_a^{e(2)} \\ y_a^{e(2)} \end{Bmatrix}, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}.$$

Für die zweidimensionale Projektionsoperation (5.389), welche ein Kreuzprodukt zwischen Vektoren in der x - y -Ebene abbildet und die Projektion von Slave-Knoten auf das gegenüberliegende Master-Element beschreibt, resultiert lediglich die implizite Komponentengleichung in z -Richtung¹

$$\left(\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(2)}} N_a^{(2)}(\xi_b^{(2)}) x_a^{e(2)} - x_b^{e(1)} \right) n_{yb} - \left(\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(2)}} N_a^{(2)}(\xi_b^{(2)}) y_a^{e(2)} - y_b^{e(1)} \right) n_{xb} = 0, \quad (\text{C.1})$$

$b = 1, 2$. Die entgegengesetzte, skalare Bestimmungsgleichung zur Projektion der Master-Knoten auf das gegenüberliegende Slave-Element, die sich aus Gl. (5.390) ableitet, lautet

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_b^{(1)}) x_a^{e(1)} - x_b^{e(2)} \right) \left(\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_b^{(1)}) n_{ya} \right) \\ & - \left(\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_b^{(1)}) y_a^{e(1)} - y_b^{e(2)} \right) \left(\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_b^{(1)}) n_{xa} \right) = 0, \quad b = 1, 2. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

¹In der vorliegenden Arbeit ist die z -Koordinatenrichtung konform mit dem Basisvektor \mathbf{e}_3 .

Bestimmung der lokalen Projektionskoordinaten für eine Kontaktschnittstellendiskretisierung mit Lin2-Elementen Ausgehend von einer Kontaktschnittstellendiskretisierung mit 2-knotigen linearen Linien-Elementen (Lin2) und den in Tabelle B.1 in Gl. (B.7) angegebenen zugehörigen Ansatzfunktionen $N_a(\xi)$, $a = 1, \dots, 2$, kann aus Gl. (C.1) eine lineare Bestimmungsgleichung für die lokalen Projektionskoordinaten $\xi_b^{(2)}$, $b = 1, 2$, abgeleitet werden. Es gilt

$$\begin{aligned} \xi_b^{(2)} &= -\frac{(x_1^{e(2)} + x_2^{e(2)} - 2x_b^{e(1)})n_{yb} - (y_1^{e(2)} + y_2^{e(2)} - 2y_b^{e(1)})n_{xb}}{(x_2^{e(2)} - x_1^{e(2)})n_{yb} - (y_2^{e(2)} - y_1^{e(2)})n_{xb}} \\ &= -\frac{\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_1^{e(2)} + \mathbf{x}_2^{e(2)} - 2\mathbf{x}_b^{e(1)}\} \times \mathbf{n}_b \right\}}{\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_2^{e(2)} - \mathbf{x}_1^{e(2)}\} \times \mathbf{n}_b \right\}}, \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

wobei offensichtlich für eine erfolgreiche Projektion die Parallelität zwischen \mathbf{n}_b und dem Differenzvektor $\mathbf{x}_2^{e(2)} - \mathbf{x}_1^{e(2)}$ ausgeschlossen werden muss, d. h. $\mathbf{n}_b \times \{\mathbf{x}_2^{e(2)} - \mathbf{x}_1^{e(2)}\} \neq \mathbf{0}$. Die Bestimmungsgleichung (C.2) für die lokalen Projektionskoordinaten $\xi_b^{(1)}$, $b = 1, 2$, führt auf die Nullstellenberechnung einer quadratischen Gleichung. Die zwei Lösungen dieser Gleichung lauten

$$\xi_{b1,2}^{(1)} = -u(v \pm w), \quad \text{mit} \quad u = \frac{1}{t}, \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} v &= (x_2^{e(1)} - x_b^{e(2)})n_{y2} - (y_2^{e(1)} - y_b^{e(2)})n_{x2} - (x_1^{e(1)} - x_b^{e(2)})n_{y1} + (y_1^{e(1)} - y_b^{e(2)})n_{x1} \\ &= \mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_2^{e(1)} - \mathbf{x}_b^{e(2)}\} \times \mathbf{n}_2 - \{\mathbf{x}_1^{e(1)} - \mathbf{x}_b^{e(2)}\} \times \mathbf{n}_1 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned} w &= \sqrt{t \left((n_{x1} + n_{x2})(y_1^{e(1)} + y_2^{e(1)} - 2y_b^{e(2)}) - (n_{y1} + n_{y2})(x_1^{e(1)} + x_2^{e(1)} - 2x_b^{e(2)}) \right) + v^2} \\ &= \sqrt{t \left(\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2\} \times \{\mathbf{x}_1^{e(1)} + \mathbf{x}_2^{e(1)} - 2\mathbf{x}_b^{e(2)}\} \right\} \right) + v^2}, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

und

$$\begin{aligned} t &= (x_2^{e(1)} - x_1^{e(1)})(n_{y2} - n_{y1}) - (y_2^{e(1)} - y_1^{e(1)})(n_{x2} - n_{x1}) \\ &= \mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_2^{e(1)} - \mathbf{x}_1^{e(1)}\} \times \{\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1\} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Aus der Selektierung $\xi_{b1,2}^{(1)} \in [-1, 1]$ folgt dann die eigentlich gesuchte Projektionskoordinate $\xi_b^{(1)}$, $b = 1, 2$. Falls $\mathbf{n}_1 \approx \mathbf{n}_2$ vorliegt, geht aufgrund der numerischen Instabilität die Lösung der quadratischen Gleichung (C.4) in die Lösung einer linearen Gleichung

$$\xi_b^{(2)} = -\frac{\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_1^{e(1)} + \mathbf{x}_2^{e(1)} - 2\mathbf{x}_b^{e(2)}\} \times \mathbf{n}_b \right\}}{\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_2^{e(1)} - \mathbf{x}_1^{e(1)}\} \times \mathbf{n}_b \right\}}, \quad (\text{C.8})$$

über, vgl. mit Gl. (C.3).

Bestimmung der lokalen Projektionskoordinaten für eine Kontaktschnittstellendiskretisierung mit Lin3-Elementen Ausgehend von einer Kontaktschnittstellendiskretisierung mit 3-knotigen quadratischen Linien-Elementen (Lin3) und den in Tabelle B.1 in Gl. (B.9) angegebenen zugehörigen Formfunktionen $N_a(\xi)$, $a = 1, \dots, 3$, kann aus Gl. (C.1) eine quadratische Bestimmungsgleichung für die lokalen Projektionskoordinaten $\xi_b^{(2)}$, $b = 1, 2$, abgeleitet werden. Für das quadratische Nullstellenproblem ergeben sich die Lösungen

$$\xi_{b1,2}^{(2)} = \frac{v \pm \sqrt{v^2 - uw}}{u}, \quad \text{mit} \quad u = 2 \left(\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_1^{e(2)} + \mathbf{x}_2^{e(2)} - 2\mathbf{x}_3^{e(2)}\} \times \mathbf{n}_b \right\} \right), \quad (C.9)$$

$$v = \mathbf{e}_3^T \left\{ \mathbf{n}_b \times \{\mathbf{x}_2^{e(2)} - \mathbf{x}_1^{e(2)}\} \right\} \quad \text{und} \quad w = 4 \left(\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_3^{e(2)} - \mathbf{x}_b^{e(1)}\} \times \mathbf{n}_b \right\} \right).$$

Bei erfolgreicher Projektion ist die eigentlich gesuchte Projektionskoordinate $\xi_b^{(2)}$, $b = 1, 2$, das Resultat aus der Selektierung $\xi_{b1,2}^{(2)} \in [-1, 1]$. Im Fall eines nicht gekrümmten Master-Elements mit äquidistant verteilten Knoten, d. h.

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \chi_t^{e(2)}(\xi^{(2)}) = \mathbf{x}_1^{e(2)} + \mathbf{x}_2^{e(2)} - 2\mathbf{x}_3^{e(2)} = \mathbf{0},$$

reduziert sich die Lösung (C.9) auf

$$\xi_b^{(2)} = \frac{w}{2v} = \frac{2 \left(\mathbf{e}_3^T \left\{ \{\mathbf{x}_3^{e(2)} - \mathbf{x}_b^{e(1)}\} \times \mathbf{n}_b \right\} \right)}{\mathbf{e}_3^T \left\{ \mathbf{n}_b \times \{\mathbf{x}_2^{e(2)} - \mathbf{x}_1^{e(2)}\} \right\}}. \quad (C.10)$$

Zur Berechnung der Nullstellen $\xi_b^{(1)}$, $b = 1, 2$, des aus Gl. (C.2) hervorgehenden Polynoms vierten Grades empfiehlt sich die Verwendung eines lokalen Newton-Raphson-Verfahrens.

Bestimmung und Selektion der slave- und master-seitigen Kontaktsegmentgrenzen

Die Segmentgrenzen $\xi_\alpha^{(1)}$, $\xi_\beta^{(1)}$, $\xi_\alpha^{(2)}$ und $\xi_\beta^{(2)}$ eines zweidimensionalen Mortar-Kontakt-Segments werden durch lokale Elementkoordinaten auf dem sich überlappenden Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) definiert. Es ist zu beachten, dass die slave- bzw. master-seitigen Segmentenden einerseits natürlichen Knotenkoordinaten oder lokalen Projektionspunkten von Knoten der gegenüberliegenden linienförmigen Elementfacette entsprechen können. Das nachfolgende Struktogramm C.1 veranschaulicht den Selektionsalgorithmus für die das Mortar-Kontakt-Segment charakterisierenden Anfangs- und Endwerte.

C.2 Mortar-Segmentierung in 3D

Wie zuvor in Abschnitt 5.5.2 dargestellt, ist die Konstruktion der dreieckförmigen Integrationszellen für ein sich überlappendes Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) das Resultat einer ausgefeilten Segmentierungsstrategie basierend auf Projektion- und Clipping-Operationen sowie einer Triangulierung. Der Clipping-Algorithmus übernimmt hierbei die Aufgabe zur Detektion des konvexen Überschneidungspolygons (Mortar-Kontakt-Segment) mit n_{cell} Ecken an den Positionen $\tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}$, $z = 1, \dots, n_{\text{cell}}$, welches aus einer

Selektionsalgorithmus — Extrahieren der Segmentgrenzen $\xi_\alpha^{(1)}$, $\xi_\beta^{(1)}$, $\xi_\alpha^{(2)}$ und $\xi_\beta^{(2)}$ aus den lokalen Projektionskoordinaten $\xi_b^{(i)}$, $i = 1, 2$, $b = 1, 2$

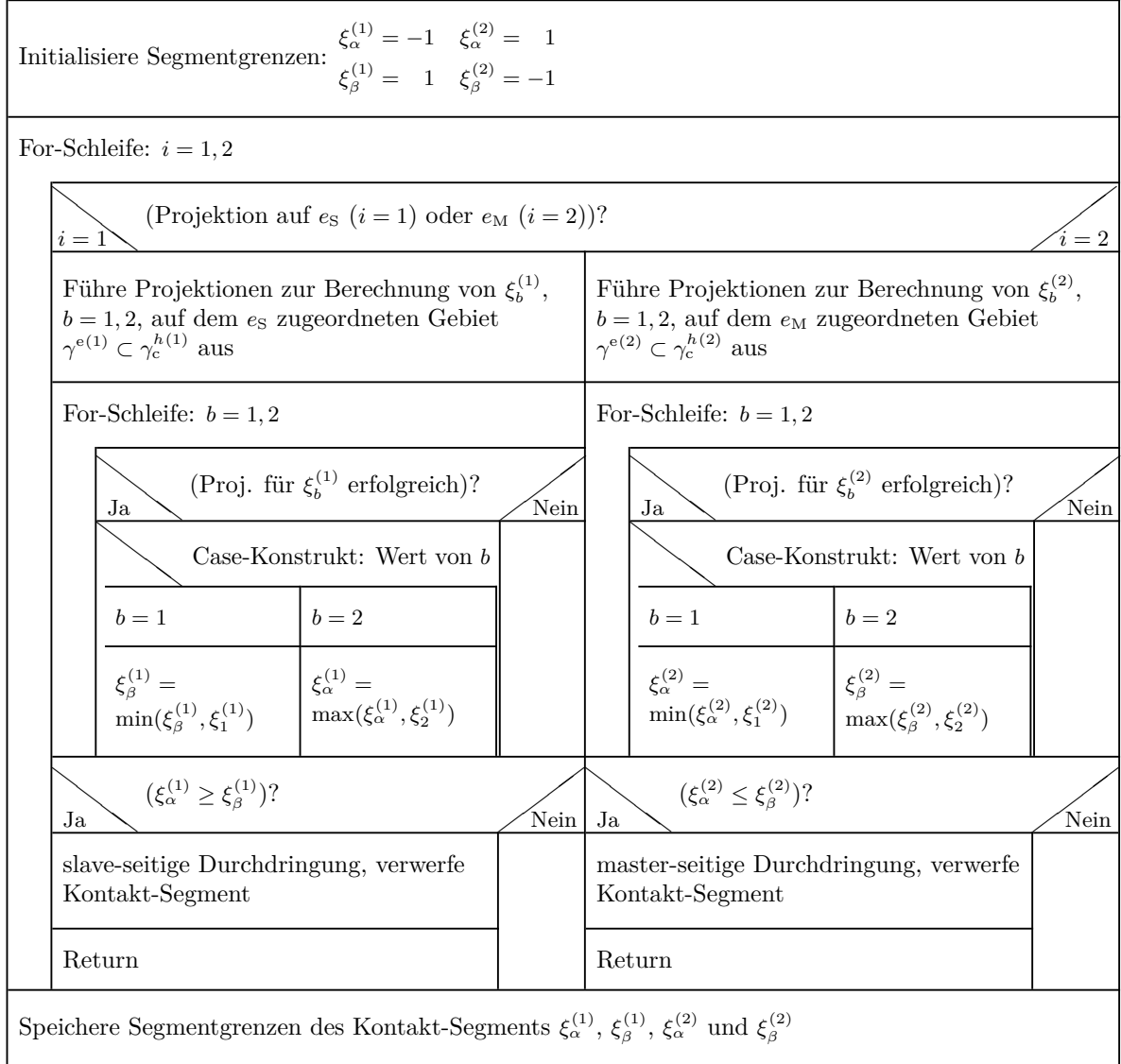


Abbildung C.1: Struktogramm für ein Selektionsalgorithmus zur Bestimmung der lokalen Segmentgrenzen $\xi_\alpha^{(1)}$, $\xi_\beta^{(1)}$, $\xi_\alpha^{(2)}$ und $\xi_\beta^{(2)}$ eines aus dem Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) hervorgehenden linienförmigen Mortar-Kontakt-Segments

Überlappung der in die Hilfsebene projizierten Elemente resultiert, siehe Abb. 5.8. Derartige Problemstellungen stammen ursprünglich aus dem Bereich der Computergrafik, siehe [Foley et al., 1995], bei denen die durch Liniensegmente² approximierten Grafikobjekte außerhalb einer fixierten geschlossenen Berandung, einem sogenannten Clipping-Fenster, abgeschnitten werden.³ Auf eine geometrisch einfache Abstraktionsebene reduziert, bedeutet dies die mehrmalige Anwendung eines Linien-Clipping-Algorithmus zur Detektion der sich potentiell im Clipping-Fenster befindenden Streckenabschnitte. Zu diesem Zweck muss das Verfahren in der Lage sein, Schnittpunkte zwischen dem Liniensegment und dem Clipping-Fenster zu bestimmen. In der vorliegenden Arbeit wird ein von Cyrus und Beck [1978] entwickelter Algorithmus zur Durchführung von Linien-Clipping-Operationen⁴ in der Ebene, siehe hierzu auch [Foley et al., 1995, S. 118–124], basierend auf einer parametrischen Darstellung des Liniensegments

$$\tilde{\mathbf{g}}(s) = \tilde{\mathbf{x}}_\alpha + s \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha\}, \quad s \in [0, 1], \quad (\text{C.11})$$

und einem beliebigen konvexen Polygonfenster adaptiert.⁵ Der Schnittpunkt $\tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}$ bzw. die parametrische Schnittpunktcoordinate $s_{\text{int}}^{(2)}$ zwischen einem durch $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}$ und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)}$ begrenzten Liniensegment und einer Kante des Clipping-Fensters, mit den Enden $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}$ und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)}$, bestimmt sich gemäß Abb. C.2 aus der Erfüllung der trivialen Beziehung

$$\tilde{\mathbf{n}}^{(1)\text{T}} \{\tilde{\mathbf{g}}^{(2)}(s_{\text{int}}^{(2)}) - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}\} = \tilde{\mathbf{n}}^{(1)\text{T}} \{\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} + s_{\text{int}}^{(2)} \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}\} = 0 \quad (\text{C.12})$$

zu

$$\tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}} = \tilde{\mathbf{g}}^{(2)}(s_{\text{int}}^{(2)}) = \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} + s_{\text{int}}^{(2)} \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\}, \quad s_{\text{int}}^{(2)} = -\frac{\tilde{\mathbf{n}}^{(1)\text{T}} \{\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}\}}{\tilde{\mathbf{n}}^{(1)\text{T}} \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\}}. \quad (\text{C.13})$$

Im Folgenden soll der Fokus auf der Erläuterung einer einzelnen Linien-Clipping-Operation liegen. Daher erfolgt eine gesonderte Kennzeichnung für die das Liniensegment absteckenden Punkte durch $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}$ und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)}$ sowie für die mit der Kante des Clipping-Fensters verbundenen Knotenkoordinaten durch $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}$ und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)}$. Es ist offensichtlich, dass die Punkte $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(i)}$, $i = 1, 2$, und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(i)}$, $i = 1, 2$, aus einer einfachen direkten Zuordnung von projizierten

²In der vorliegenden Arbeit wird ein Liniensegment oder eine Strecke als ein Geradenabschnitt definiert, der durch zwei Punkte \mathbf{x}_α und \mathbf{x}_β begrenzt ist.

³Für die Anwendung eines für die Ebene entwickelten Linien-Clipping-Algorithmus muss das Clipping-Fenster zusätzlich konvex sein.

⁴Alternativ zum Cyrus-Beck-Algorithmus ist auch der Einsatz des in [Sutherland und Hodgman, 1974] angegebenen allgemeineren Algorithmus vorstellbar. Im Gegensatz zum erstgenannten Verfahren ist dieser gesamtheitlich auf konvexe oder konkave zu beschneidende Grafikobjekte anwendbar.

⁵Bezogen auf Abb. 5.8e kann einerseits das projizierte Slave-Element oder das projizierte Master-Element die Rolle des Clipping-Fenster einnehmen. Die andere Elementfacette initiiert in einer Schleife die Funktion der einzelnen Liniensegmente. Des Weiteren ist der vielseitige parametrische Cyrus-Beck-Algorithmus im Gegensatz zu vielen anderen Linien-Clipping-Operatoren, siehe exemplarisch hierzu [Liang und Barsky, 1983; Liang und Barsky, 1984; Sobkow et al., 1987; Nicholl et al., 1987; Sharma und Manohar, 1992; Duvanenko et al., 1993] oder den in [Foley et al., 1995] porträtierten Cohen-Sutherland-Algorithmus, nicht auf achsenparallele, rechteckige Clipping-Regionen beschränkt. Für eine effiziente Umsetzung des Cyrus-Beck-Algorithmus sei auf [Foley et al., 1995] sowie [Skala, 1993] verwiesen.

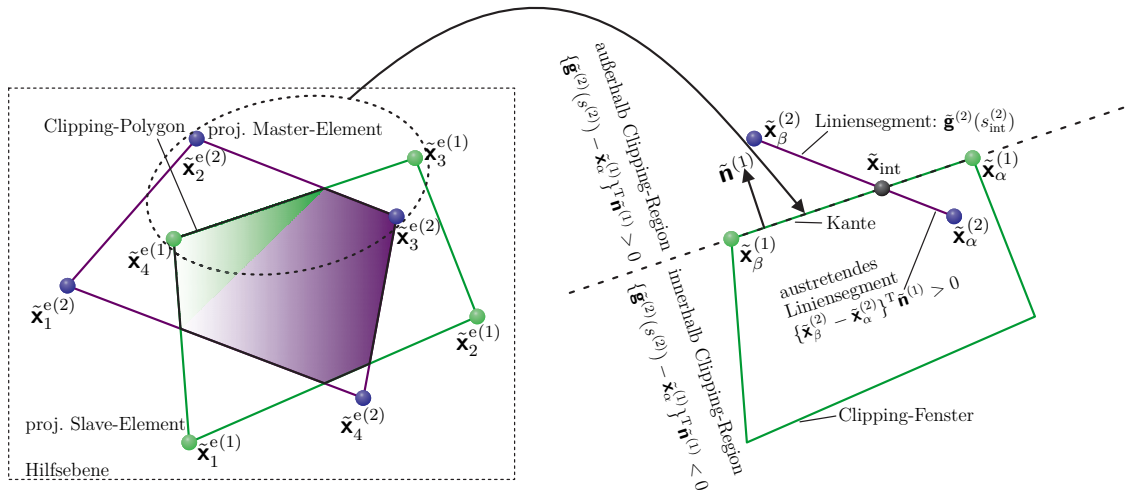


Abbildung C.2: Detektion des Überschneidungspolygons mit Hilfe des parametrischen Linien-Clipping-Algorithmus nach Cyrus und Beck [1978]

Elementkoordinaten $\tilde{\mathbf{x}}_a^{(i)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(i)}$, $i = 1, 2$, resultieren, siehe auch Abb. C.2. Der an die jeweilige Kante des Clipping-Fensters nach außen gerichtete Normalenvektor wird durch $\tilde{\mathbf{n}}^{(1)}$ repräsentiert. Alternativ zum Bezugspunkt $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}$ in Gl. (C.12) kann auch $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)}$ gewählt werden. Unter Verwendung der Definition (5.355) für den Normalenvektor \mathbf{n}_0 der Hilfsebene und der hierzu konsistenten Beziehung $\tilde{\mathbf{n}}^{(1)} = \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}\} \times \mathbf{n}_0$ ergibt sich

$$\tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}} = \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} + s_{\text{int}}^{(2)} \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\}, \quad s_{\text{int}}^{(2)} = -\frac{\mathbf{n}_0^T \left\{ \{\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}\} \times \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}\} \right\}}{\mathbf{n}_0^T \left\{ \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\} \times \{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}\} \right\}}. \quad (\text{C.14})$$

Gleichzeitig gibt das Vorzeichen des Skalarprodukts im Nenner von Gl. (C.13)₂ Auskunft darüber, ob ein Liniensegment in dem von einer Kante des Clipping-Fensters annektierten zweidimensionalen Halbraum eintritt, $\{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\}^T \tilde{\mathbf{n}}^{(1)} < 0$, oder in den äußeren Halbraum austritt, $\{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\}^T \tilde{\mathbf{n}}^{(1)} > 0$.⁶ Auf Basis dieser Klassifizierung ist es möglich, Streckenabschnitte der Liniensegmente innerhalb des Clipping-Fensters zu identifizieren bzw. gänzlich nicht überlappende Liniensegmente zu verwerfen, siehe hierzu auch [Foley et al., 1995, S.118–124]. Es ist zu beachten, dass im Fall von zueinander parallelen Kanten und Liniensegmenten, $\{\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}\}^T \tilde{\mathbf{n}}^{(1)} = 0$, eine Schnittstellenberechnung durch Gl. (C.13) bzw. Gl. (C.14) nicht länger gültig ist. Solche pathologischen Fälle werden jedoch ebenfalls im Rahmen des Cyrus-Beck-Algorithmus korrekt behandelt.

Für eine vollständige Bestimmung aller Ecken des Überschneidungspolygons ist es erforderlich, die zugewiesenen Rollen von Clipping-Fenster und Liniensegmenten zu vertauschen, sodass auch die in Abb. C.2 grün gefärbte Region detektiert werden kann. Der Rollentausch, d. h. das projizierte Master-Element übernimmt die Funktion des Clipping-Fensters und die Liniensegmente werden durch die Seiten der projizierten Slave-Facette

⁶Die Kanten des Clipping Polygons werden als Geraden aufgefasst, wobei jede Kante die Ebene in zwei Halbräume teilt.

repräsentiert, impliziert die folgende Modifikation für die Schnittstellenberechnung:⁷

$$\tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}} = \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} + s_{\text{int}}^{(1)} \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} \right\}, \quad s_{\text{int}}^{(1)} = - \frac{\mathbf{n}_0^T \left\{ \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \right\} \times \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \right\} \right\}}{\mathbf{n}_0^T \left\{ \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} \right\} \times \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \right\} \right\}} \quad (\text{C.15})$$

Nach Durchführung sämtlicher Clipping-Operationen und der Bestimmung aller Ecken des Überschneidungspolygons werden in Anlehnung an Weßenfels [2013] sowie der dort zitierten Literatur die Eckpunkte gefiltert⁸ und in Bezug auf die Hilfsebene entgegen dem Uhrzeigersinn sortiert, sodass hieraus die Positionsvektoren $\tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}$, $z = 1, \dots, n_{\text{cell}}$, hervorgehen. Hierauf folgt gemäß Gl. (5.358) die Lokalisation des geometrischen Zentrums $\tilde{\mathbf{x}}_c$ des aus den projizierten Slave- und Master-Element gebildeten Polygons und die Triangulierung in n_{cell} Integrationszellen, mit den Koordinaten $\tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}$, $\mu = 1, \dots, 3$. Aus der Rekapitulation des aufgezeigten Segmentierungsprozesses wird ersichtlich, dass der Eckpunkt einer Integrationszelle $\tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}$ seinen Ursprung in einem der vier in Abb. C.3 gezeigten Standardfällen hat. Die folgende Auflistung gibt diese in kompakter Form

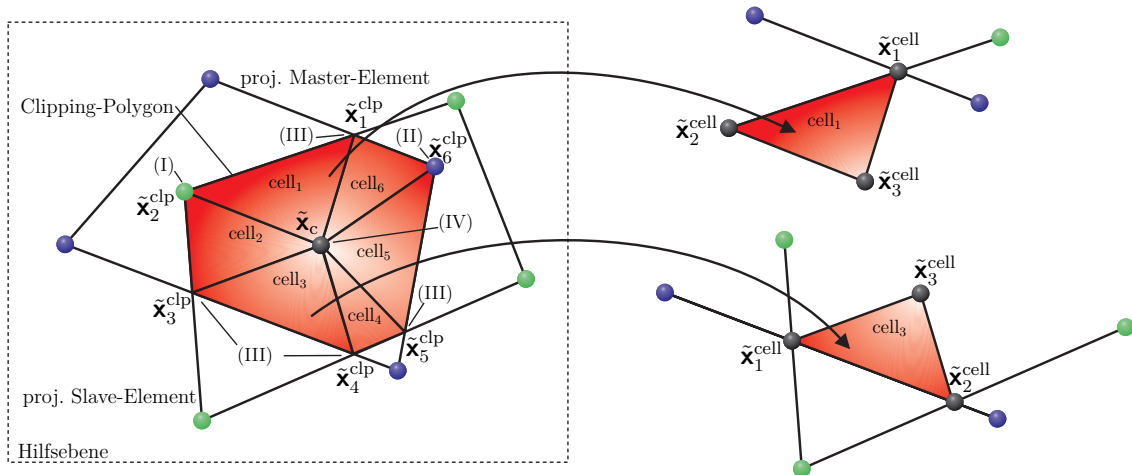


Abbildung C.3: Triangulierung des aus den projizierten Slave- und Master-Element gebildeten Polygons in Integrationszellen sowie Darstellung des lokalen Übergangs auf die Ebene einer Integrationszelle mit den Ecken $\tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}$, $\mu = 1, \dots, 3$, und deren Ursprung aus einem von vier Standardfällen (I) bis (IV)

wieder.

Standardfall (I): Der Eckpunkt einer Integrationszelle $\tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}$ entspricht einem projizierten

⁷Hierbei ist auf eine konsistente Orientierung für den Start- und Endpunkt der Kante, $\tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)}$ und $\tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)}$, in Bezug auf \mathbf{n}_0 zu achten, sodass $\tilde{\mathbf{n}}^{(2)} = \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \right\} \times \mathbf{n}_0$ weiterhin einen an die Kante nach außen gerichteten Normalenvektor symbolisiert.

⁸Eine Filterung ist notwendig, da aufgrund des Rollentausches die Eckpunkte des Überschneidungspolygons eventuell mehrfach detektiert werden. Zudem ist es sinnvoll, sehr nahe beieinander liegende Punkte zusammenzufassen.

Slave-Knoten $\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(1)}$ aus dem Satz $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$. Gemäß Gl. (5.356) gilt:

$$\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} = \tilde{\mathbf{x}}_a^{e(1)} = \mathbf{x}_a^{e(1)} - \left(\left\{ \mathbf{x}_a^{e(1)} - \mathbf{x}_0^{(1)} \right\}^T \mathbf{n}_0 \right) \mathbf{n}_0 \quad (\text{C.16})$$

Standardfall (II): Der Eckpunkt einer Integrationszelle $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$ entspricht einem projizierten Master-Knoten $\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(2)}$ aus dem Satz $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}$. Gemäß Gl. (5.357) gilt:

$$\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} = \tilde{\mathbf{x}}_a^{e(2)} = \mathbf{x}_a^{e(2)} - \left(\left\{ \mathbf{x}_a^{e(2)} - \mathbf{x}_0^{(1)} \right\}^T \mathbf{n}_0 \right) \mathbf{n}_0 \quad (\text{C.17})$$

Standardfall (III): Der Eckpunkt einer Integrationszelle $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$ ist das Resultat einer Linien-Clipping-Operation (C.14) bzw. (C.15). Es gilt:

$$\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} = \tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}} \quad (\text{C.18})$$

Standardfall (IV): Der Eckpunkt einer Integrationszelle $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$ entspricht dem geometrischen Clipping-Polygon Zentrum $\tilde{\mathbf{x}}_c$. Es gilt:

$$\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} = \tilde{\mathbf{x}}_c \quad (\text{C.19})$$

Darüber hinaus müssen einige pathologische Sonderfälle, siehe Abb. C.4, zur Kategori-

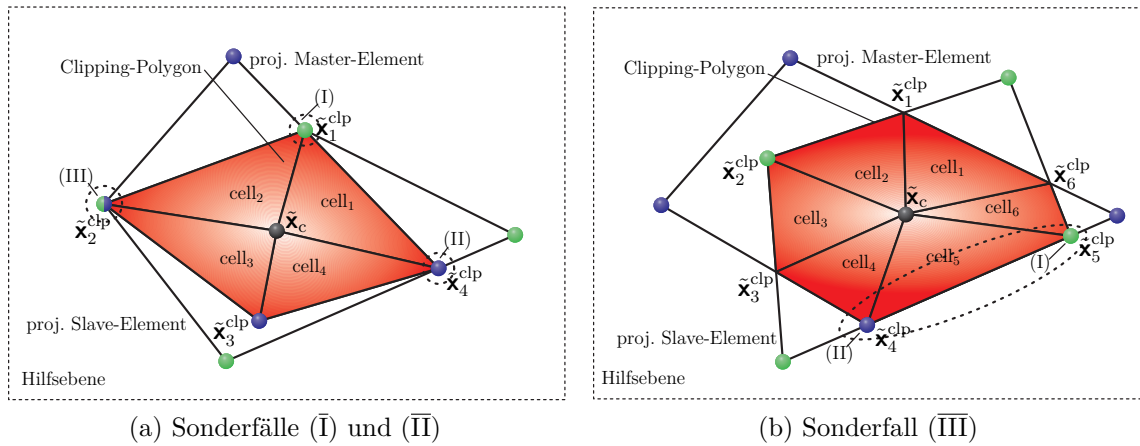


Abbildung C.4: Darstellung mehrdeutiger, pathologischer Sonderfälle im Rahmen des Cyrus-Beck-Algorithmus und deren Zurückführung auf die Standardfälle (I) bis (III)

sierung von $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$ betrachtet werden, welche zwar vom Cyrus-Beck-Algorithmus erkannt werden, jedoch aus Sicht des Autors der vorliegenden Monographie einer Modifikation bedürfen.

Sonderfall (I): Ein projizierter Knoten liegt exakt auf einer Kante des anderen Elements. Der Eckpunkt der Integrationszelle wird als Standardfall (I) bzw. Standardfall (II) imitiert.

Sonderfall (II): Ein projizierter Slave- und Master-Knoten überlappen exakt im selben Punkt. Die Ecke der Integrationszelle wird durch den Schnittpunkt der zugeordneten Randabschnitte, d. h. als Standardfall (III), abgebildet.

Sonderfall (III): Die Kanten der projizierten Slave- und Master- Elemente verlaufen exakt aufeinander. In Anlehnung an Puso und Laursen [2004a] und Puso und Laursen [2004b] werden die zwei Eckpunkte der Integrationszelle in die Standardfälle (I) oder (II) überführt.

C.3 Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation

In dem folgenden Abschnitt sollen die Erläuterungen für das elementweise Berechnungskonzept aus Abschnitt 5.5.4.2 zur Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, in einen visuellen Kontext gebracht werden. Unter Bezug auf vollständig überdeckte Slave-Elemente in der Kontaktschnittstelle liegt der Fokus auf der Wiedergabe von einigen a priori bestimmbar analytischen Ausdrücken für die dualen Formfunktionen sowie einigen Sonderfällen in Verbindung mit einer unverzerrten Elementgeometrie, sodass eine vollständige Beschreibung von Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, innerhalb des slave-seitigen Parameterraums $\Omega_{\square}^{(1)}$ mit Hilfe einer konstanten Koeffizientenmatrix \mathbf{A}^e , siehe Gl. (5.414), und den isoparametrischen Interpolationsansätzen aus Tab. B.1 $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, ermöglicht wird. Die in Teilabschnitt 5.5.4.2 erörterte Deformationsabhängigkeit, der die dualen Interpolationsansätze unterworfen sind, kann aufgrund der limitierten Abstrahierung für die nachfolgende Visualisierung ausgeblendet werden. Für weitere Details zu den dualen Formfunktionen Ξ_a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, sei auf die sehr umfassende Analyse in [Popp, 2012] verwiesen.

Zweidimensionale Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation Das Spektrum der zweidimensionalen Finite-Elemente-Diskretisierungen in der vorliegenden Arbeit umfasst Quad4-, Quad8-, Quad9-, Tri3- und Tri6-Elementformen. Die von diesen Elementen auf die Berandung einer Struktur projizierten Oberflächenfacetten sind wiederum vom Typ Lin2 oder Lin3. Im folgenden Paragraph sollen für diese Oberflächenelementformen die in Abschnitt 5.5.4.2 eingeführten dualen Ansatzfunktionen für das Lagrange-Multiplikatorfeld visualisiert und mit den Standardansatzfunktionen für die primale Variable verglichen werden.

Aufgrund einer nicht deformationsabhängigen Jacobi-Determinante gelingt es ohne Kenntnis des Deformationszustands des Elements die dualen Ansatzfunktionen Ξ_a , $a = 1, 2$, für ein Lin2-Interface-Element bereits zum Initialisierungszeitpunkt zu bestimmen. Es ergeben sich die folgenden linearen Beziehungen

$$\Xi_1(\xi^{(1)}) = \frac{1}{2}(1 - 3\xi^{(1)}), \quad \Xi_2(\xi^{(1)}) = \frac{1}{2}(1 + 3\xi^{(1)}) \quad (\text{C.20})$$

bzw. in Matrixform

$$\begin{Bmatrix} \Xi_1(\xi^{(1)}) \\ \Xi_2(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}}^{\mathbf{A}^e} \begin{Bmatrix} N_1^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_2^{(1)}(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix}, \quad (\text{C.21})$$

die gemeinsam mit den slave-seitigen Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\xi^{(1)})$, $a = 1, 2$, in Abb. C.5 dargestellt sind. Um die lokale Biorthogonalitätsbedingung (5.409) auf

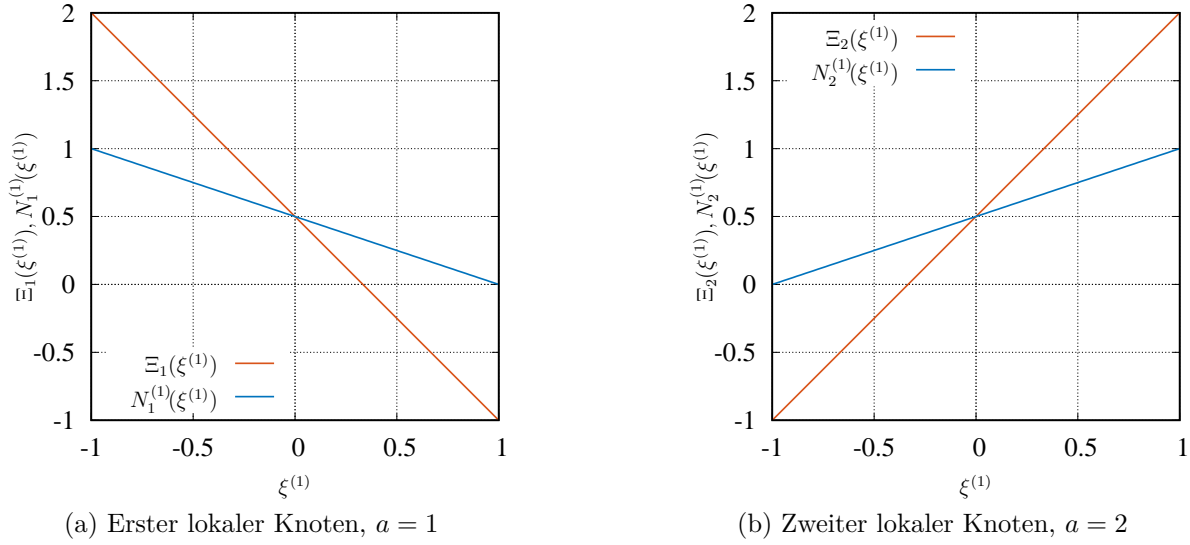


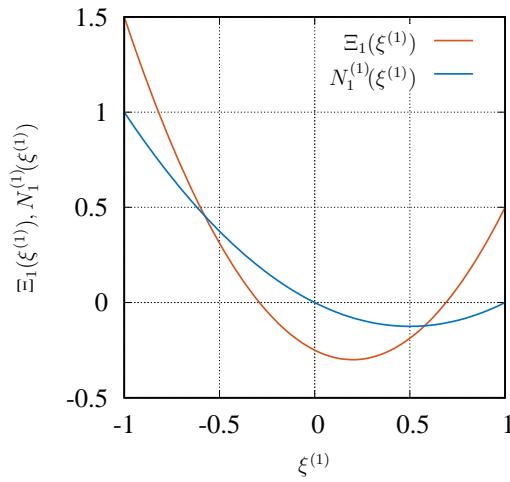
Abbildung C.5: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, 2$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\xi^{(1)})$, $a = 1, 2$, für ein 2-knotiges lineares Linien-Element (Lin2)

$\gamma^{e(1)}$ zu erfüllen, besitzen die Funktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, 2$, nicht länger im gesamten Elementgebiet einen positiven Kurvenverlauf. Wie in Abschnitt 5.5.4.2 gezeigt wird, ist zumindest das Kriterium der integralen Positivität auf dem Gebiet $\gamma^{e(1)}$ gewährleistet. Bei den visualisierten lokalen, auf $\Omega_{\square}^{(1)}$ stetigen Polynomverläufen $\Xi_1(\xi^{(1)})$ und $\Xi_2(\xi^{(1)})$ handelt es sich, bezogen auf über $\gamma^{e(1)}$ hinausgehende Bereiche, um diskontinuierliche Funktionen. Die Diskontinuitäten treten an den Elementübergängen auf. Die getroffenen Aussagen gelten für alle in dieser Arbeit behandelten dualen Ansatzfunktionen.

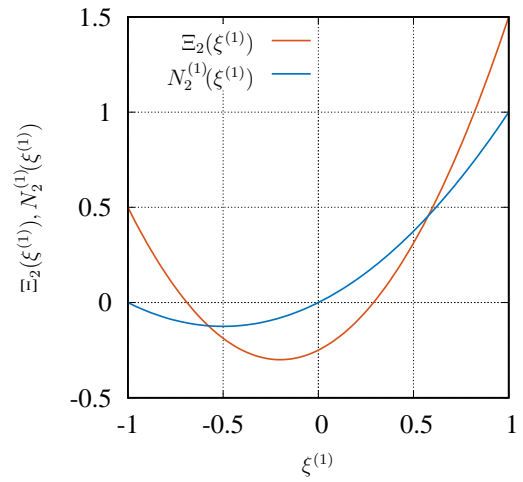
Im Allgemeinen ergibt die elementweise definierte Jacobi-Determinante $\det \mathbf{j}^{e(1)} = \det \text{Grad}_{\xi} \chi_t^{e(1)}(\xi^{(1)})$ der Koordinatentransformation $\mathbf{x}^{h(1)} = \chi_t^{e(1)}(\xi^{(1)})$ für Lin3-Facetten keinen konstanten Ausdruck. Aus diesem Grund muss eine Konstruktion der dualen Ansatzfunktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 3$, nach der in Abschnitt 5.5.4.2 geschilderten konzeptionellen Vorgehensweise erfolgen. Allerdings können für den Spezialfall eines unverzerrten Elements wegen $\det \mathbf{j}^{e(1)} = \text{const.}$ die dualen Interpolationsansätze als

$$\begin{Bmatrix} \Xi_1(\xi^{(1)}) \\ \Xi_2(\xi^{(1)}) \\ \Xi_3(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} 3/2 & 1/2 & -1/4 \\ 1/2 & 3/2 & -1/4 \\ -1 & -1 & 3/2 \end{bmatrix}}^{\mathbf{A}^e} \begin{Bmatrix} N_1^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_2^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_3^{(1)}(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix} \quad (\text{C.22})$$

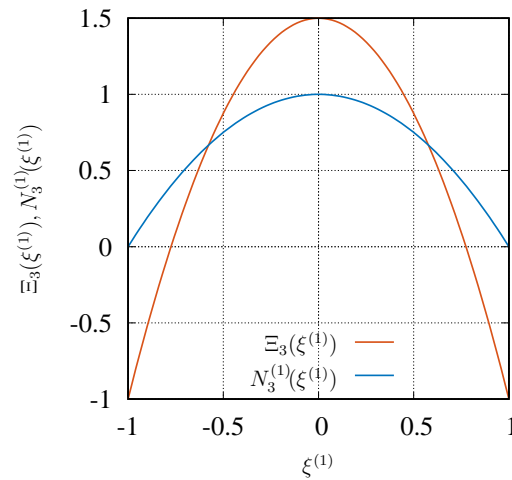
spezifiziert werden. Entsprechende Illustrationen, die $N_a^{(1)}(\xi^{(1)})$ und $\Xi_a(\xi^{(1)})$ für $a = 1, \dots, 3$ miteinander vergleichen, sind Abb. C.6 zu entnehmen.



(a) Erster lokaler Knoten, $a = 1$



(b) Zweiter lokaler Knoten, $a = 2$



(c) Dritter lokaler Knoten, $a = 3$

Abbildung C.6: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 3$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 3$, für ein unverzerrtes 3-knotiges lineares Linien-Element (Lin3)

Dreidimensionale Duale-Lagrange-Multiplikator Interpolation Das Spektrum der dreidimensionalen Finite-Elemente-Diskretisierungen in der vorliegenden Arbeit umfasst Hex8-, Hex20-, Hex27-, Tet4- und Tet10-Elementformen. Diese Elemente projizieren auf die Berandung einer Struktur Oberflächenfacetten vom Typ Quad4, Quad8, Quad9, Tri3- oder Tri6. Im folgenden Paragraph sollen für diese Facettenformen die in Abschnitt 5.5.4.2 eingeführten dualen Ansatzfunktionen für das Lagrange-Multiplikatorfeld visualisiert und mit den Standardansatzfunktionen für die primale Variable verglichen werden.

Beginnend mit linearen Interpolationsansätzen können für Tri3-Facetten, welche sich als einzige dreidimensionale Interface-Elemente durch eine konstante Jacobi-Determinante auszeichnen, a priori die folgenden dualen Ansatzfunktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 3$, angegeben werden:

$$\begin{Bmatrix} \Xi_1(\xi^{(1)}) \\ \Xi_2(\xi^{(1)}) \\ \Xi_3(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{bmatrix}}^{\mathbf{A}^e} \begin{Bmatrix} N_1^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_2^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_3^{(1)}(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix} \quad (\text{C.23})$$

Entsprechende Illustrationen, die $N_a^{(1)}(\xi^{(1)})$ und $\Xi_a(\xi^{(1)})$ für $a = 1, \dots, 3$ miteinander vergleichen, sind Abb. C.7 zu entnehmen.

Bezugnehmend auf Quad4-Oberflächenfacetten hängen die bilinearen dualen Ansatzfunktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 4$, von der aktuellen Elementverzerrung ab. Es gelingt daher nur für das pathologische Szenario eines unverzerrten Viereckelements die dualen Formfunktionen in Gestalt von

$$\begin{Bmatrix} \Xi_1(\xi^{(1)}) \\ \Xi_2(\xi^{(1)}) \\ \Xi_3(\xi^{(1)}) \\ \Xi_4(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 & -2 \\ -2 & 4 & -2 & 1 \\ 1 & -2 & 4 & -2 \\ -2 & 1 & -2 & 4 \end{bmatrix}}^{\mathbf{A}^e} \begin{Bmatrix} N_1^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_2^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_3^{(1)}(\xi^{(1)}) \\ N_4^{(1)}(\xi^{(1)}) \end{Bmatrix} \quad (\text{C.24})$$

zu bestimmen, siehe Abb. C.8. Für Beispielberechnungen zur Konstruktion von elementweise definierter dualer Formfunktionen verzerrter Quad4-Oberflächenfacetten sei auf [Flemisch und Wohlmuth, 2007; Hartmann, 2007] verwiesen.

Popp [2012] zeigt, dass das Quad9-Element als einzige dreidimensionale Facettenform mit quadratischem Ansatz das Kriterium (5.404)₁ für alle lokalen Knoten des Elements erfüllt. Erst hierdurch wird eine plausible Konstruktion von Ξ_a , $a = 1, \dots, 9$, basierend auf den Gl. (5.413) und (5.414), realisiert. Darüber hinaus ist leicht einzusehen, dass sich neben 4-knotigen auch die 9-knotigen vierseitigen Facetten durch eine deformationsabhängige Jacobi-Determinante auszeichnen. Für eine unverzerrte Elementgeometrie resultieren die

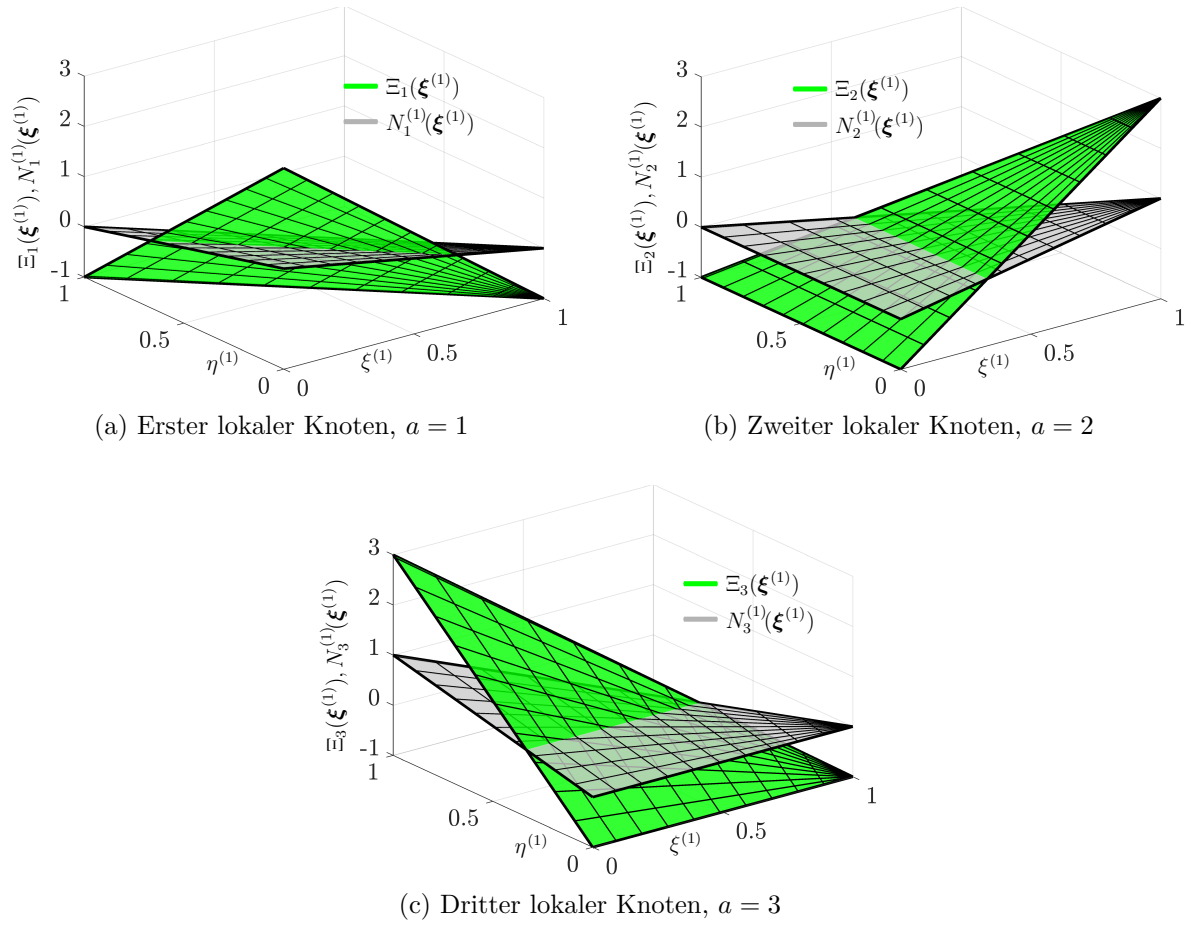
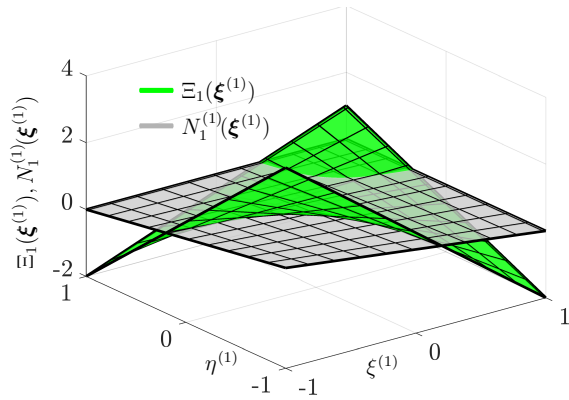
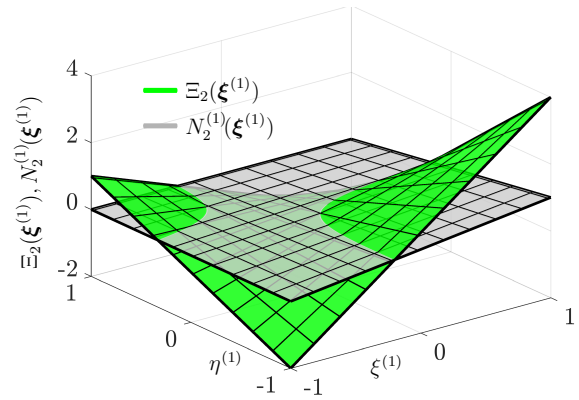


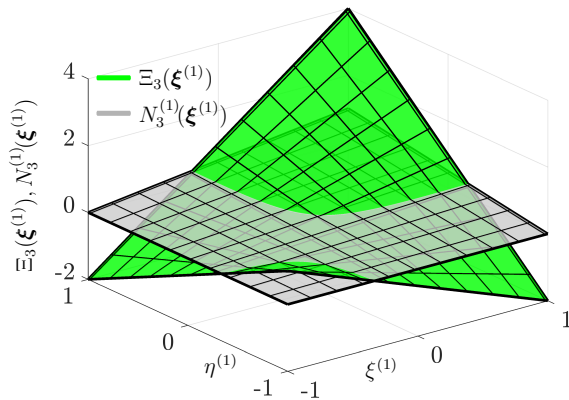
Abbildung C.7: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 3$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 3$, für ein 3-knotiges lineares Dreieck-Element (Tri3)



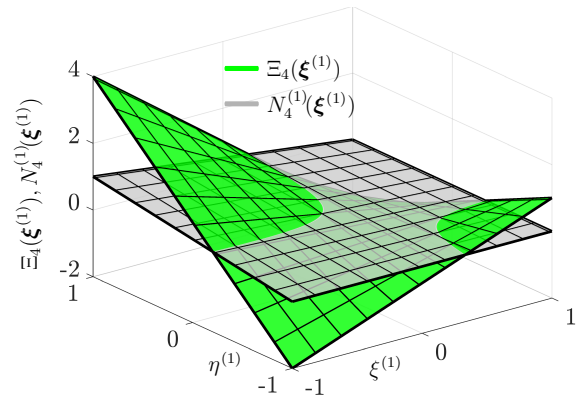
(a) Erster lokaler Knoten, $a = 1$



(b) Zweiter lokaler Knoten, $a = 2$



(c) Dritter lokaler Knoten, $a = 3$



(d) Vierter lokaler Knoten, $a = 4$

Abbildung C.8: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 4$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 4$, für ein unverzerrtes 4-knotiges lineares Viereck-Element (Quad4)

in Abb. C.9 dargestellten orthogonalisierten Interpolationsansätze:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} \Xi_1(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \\ \Xi_2(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \\ \vdots \\ \Xi_9(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \end{pmatrix} &= \overbrace{\begin{bmatrix} \frac{9}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{3}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{3}{8} & \frac{1}{16} \\ \frac{3}{4} & \frac{9}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{16} \\ \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \frac{9}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{16} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \frac{9}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & \frac{1}{16} \\ -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{9}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{3}{8} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{9}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{3}{8} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{9}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{3}{8} \\ -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{9}{4} & -\frac{3}{8} \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & \frac{9}{4} \end{bmatrix}}^{\mathbf{A}^e} \begin{pmatrix} N_1^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \\ N_2^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \\ \vdots \\ N_9^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \end{pmatrix} \quad (\text{C.25})
 \end{aligned}$$

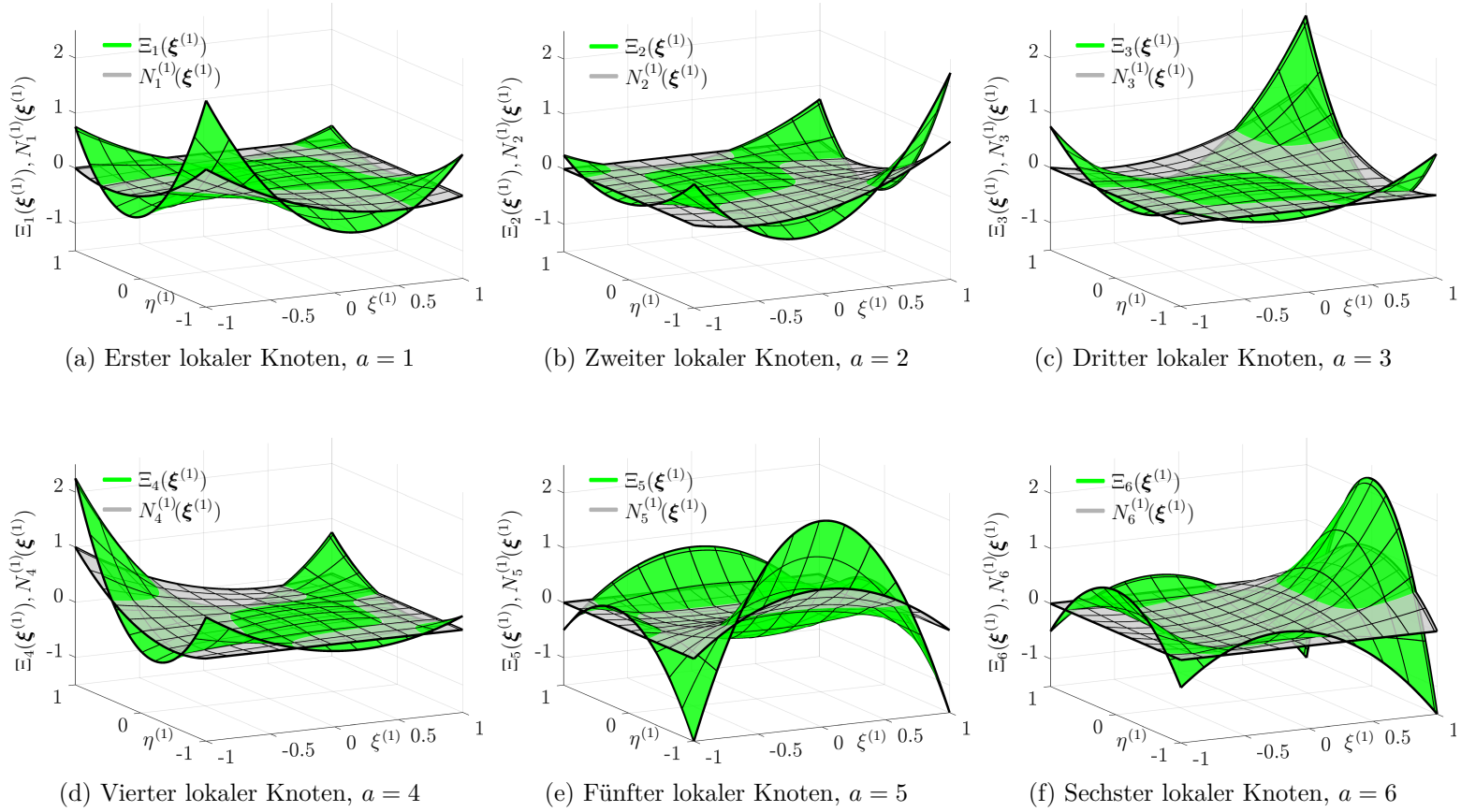


Abbildung C.9: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 9$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 9$, für ein unverzerrtes 9-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad9)

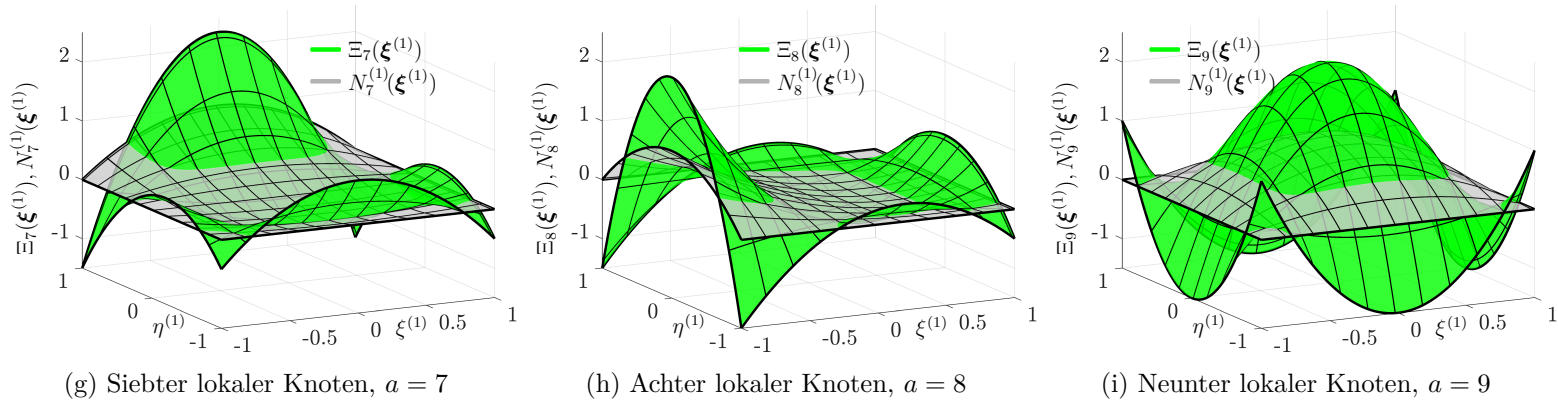


Abbildung C.9: Fortsetzung: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 9$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 9$, für ein unverzerrtes 9-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad9)

Wie zuvor in Abschnitt 5.5.4.3 angemerkt, müssen die Standardinterpolationsansätze zur Konstruktion geeigneter dualer Formfunktionen für Quad8- und Tri6-Oberflächenfacetten, basierend auf einem Vorschlag von Popp et al. [2012], einer Basistransformation (5.430) unterzogen werden. Es resultieren die in den Abbildungen C.10 und C.11 gezeigten modifizierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, welche nun auch für die kritischen Eckknoten $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}/2$ das Kriterium der integralen Positivität (5.429) erfüllen. Es sei darauf hingewiesen, dass die für partiell integrierte Slave-Elemente essentielle Forderung nach $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) \geq 0$ an den Eckknoten $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}/2$ durch die Basistransformation (5.430) nicht realisiert werden kann. Die zugehörigen konstanten Transformationsmatrizen \mathbf{T}^e für die Quad8- und Tri6-Oberflächenelemente lauten gemäß Gl. (5.431)

$$\mathbf{T}^e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{\mathbf{T}^e} & \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 & 1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{\mathbf{T}^e} & \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 & 1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{\mathbf{T}^e} & \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 & 1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e} & 0 \\ \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 & \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 & 0 & 1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e} \end{bmatrix} \quad (\text{C.26})$$

und

$$\mathbf{T}^e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{\mathbf{T}^e} & \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{\mathbf{T}^e} & \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e} & 0 \\ \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & \beta_{\mathbf{T}^e} & 0 & 0 & 1 - 2\beta_{\mathbf{T}^e} \end{bmatrix}, \quad (\text{C.27})$$

mit $\beta_{\mathbf{T}^e} = 1/5$.

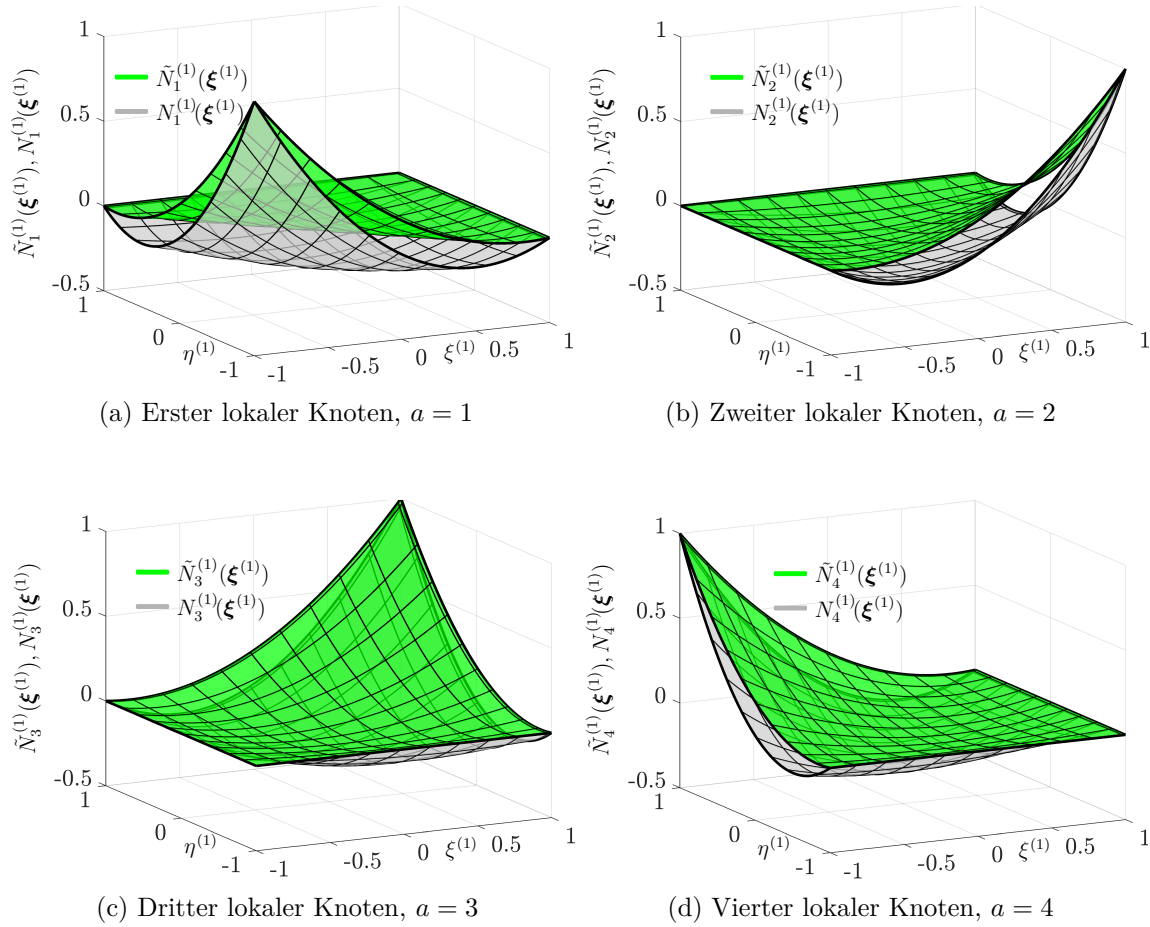
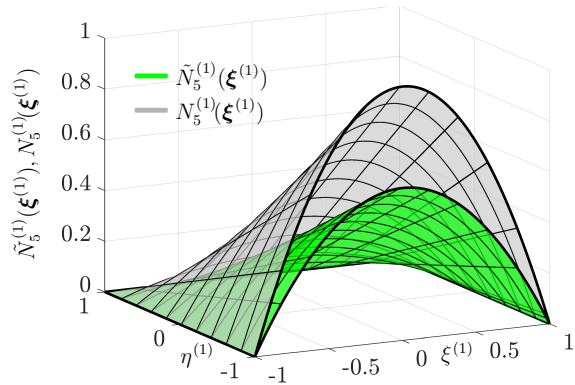
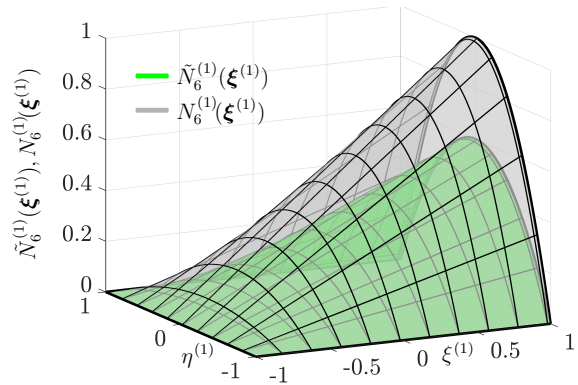


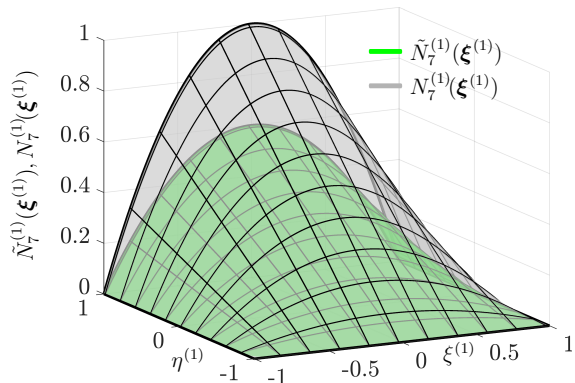
Abbildung C.10: Vergleich von basistransformierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, für ein 8-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad8)



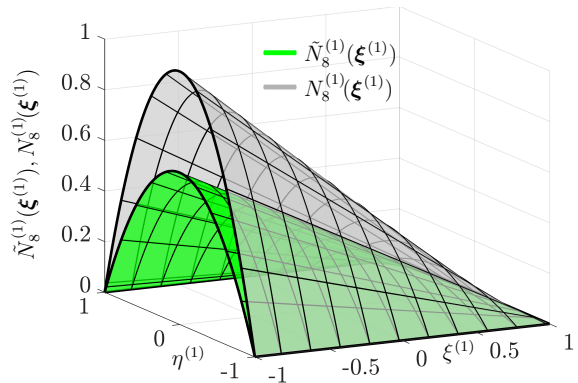
(e) Fünfter lokaler Knoten, $a = 5$



(f) Sechster lokaler Knoten, $a = 6$



(g) Siebter lokaler Knoten, $a = 7$



(h) Achter lokaler Knoten, $a = 8$

Abbildung C.10: Fortsetzung: Vergleich von basistransformierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, für ein 8-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad8)

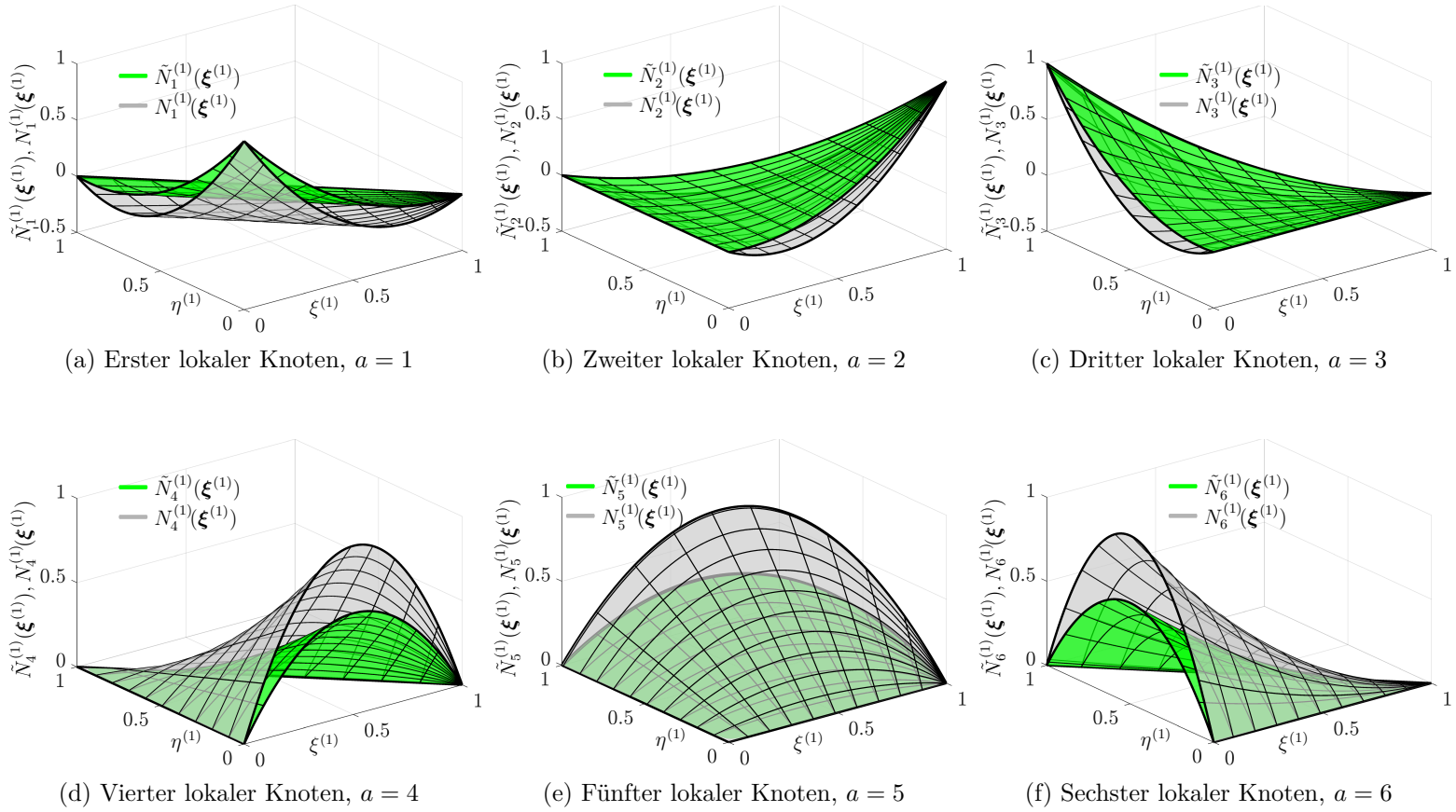


Abbildung C.11: Vergleich von basistransformierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 6$, mit Standardinterpolationsansätzen $N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 6$, für ein 6-knotiges quadratisches Dreieck-Element (Tri6)

Infolge des Austauschs der Standardansatzfunktionen $N_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, in der Biorthogonalitätsbedingung (5.409) durch die modifizierten slave-seitigen Formfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, können nun zulässige duale Interpolationsansätze für die Lagrange-Multiplikatoren konstruiert werden. Diese sind erneut für eine unverzerzte Quad8- und Tri6-Elementgeometrie in den Abbildungen C.12 und C.13 veranschaulicht. Die Formulierung als lineare Abbildung lautet:

$$\begin{Bmatrix} \Xi_1 \\ \Xi_2 \\ \vdots \\ \Xi_8 \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} 2.8 & 0.1 & -0.8 & 0.1 & -1.05 & 0.9 & 0.9 & -1.05 \\ 0.1 & 2.8 & 0.1 & -0.8 & -1.05 & -1.05 & 0.9 & 0.9 \\ -0.8 & 0.1 & 2.8 & 0.1 & 0.9 & -1.05 & -1.05 & 0.9 \\ 0.1 & -0.8 & 0.1 & 2.8 & 0.9 & 0.9 & -1.05 & -1.05 \\ -4.2 & -4.2 & 3.6 & 3.6 & 10.8 & -2.8 & -3.9 & -2.8 \\ 3.6 & -4.2 & -4.2 & 3.6 & -2.8 & 10.8 & -2.8 & -3.9 \\ 3.6 & 3.6 & -4.2 & -4.2 & -3.9 & -2.8 & 10.8 & -2.8 \\ -4.2 & 3.6 & 3.6 & -4.2 & -2.8 & -3.9 & -2.8 & 10.8 \end{bmatrix}}^{\mathbf{A}^e} \begin{Bmatrix} \tilde{N}_1^{(1)} \\ \tilde{N}_2^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{N}_8^{(1)} \end{Bmatrix} \quad (\text{C.28})$$

bzw.

$$\begin{Bmatrix} \Xi_1 \\ \Xi_2 \\ \vdots \\ \Xi_6 \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} 4.8 & 0.8 & 0.8 & -2.2 & 0.8 & -2.2 \\ 0.8 & 4.8 & 0.8 & -2.2 & -2.2 & 0.8 \\ 0.8 & 0.8 & 4.8 & 0.8 & -2.2 & -2.2 \\ -3.3 & -3.3 & 1.2 & 7.95 & -1.675 & -1.675 \\ 1.2 & -3.3 & -3.3 & -1.675 & 7.95 & -1.675 \\ -3.3 & 1.2 & -3.3 & -1.675 & -1.675 & 7.95 \end{bmatrix}}^{\mathbf{A}^e} \begin{Bmatrix} \tilde{N}_1^{(1)} \\ \tilde{N}_2^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{N}_6^{(1)} \end{Bmatrix} \quad (\text{C.29})$$

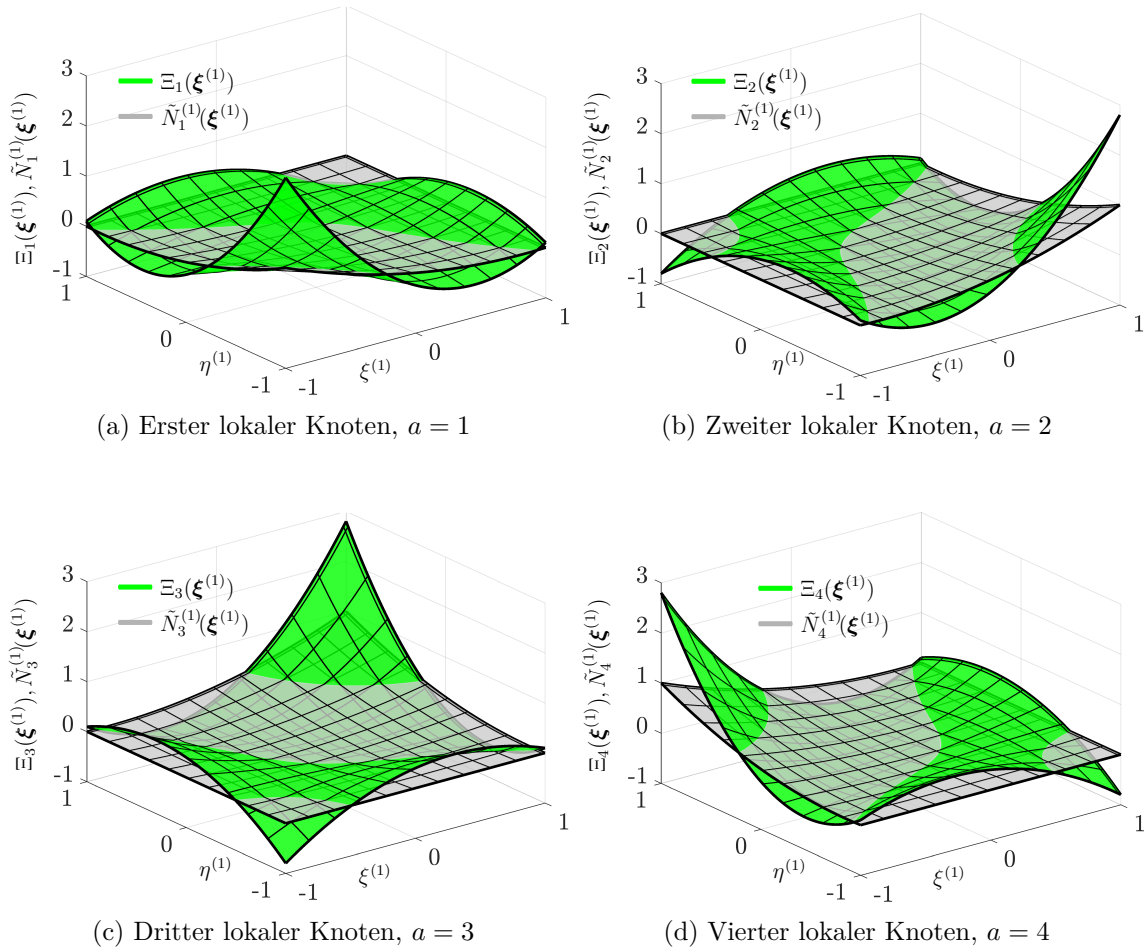


Abbildung C.12: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, mit basistransformierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, für ein unverzerrtes 8-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad8)

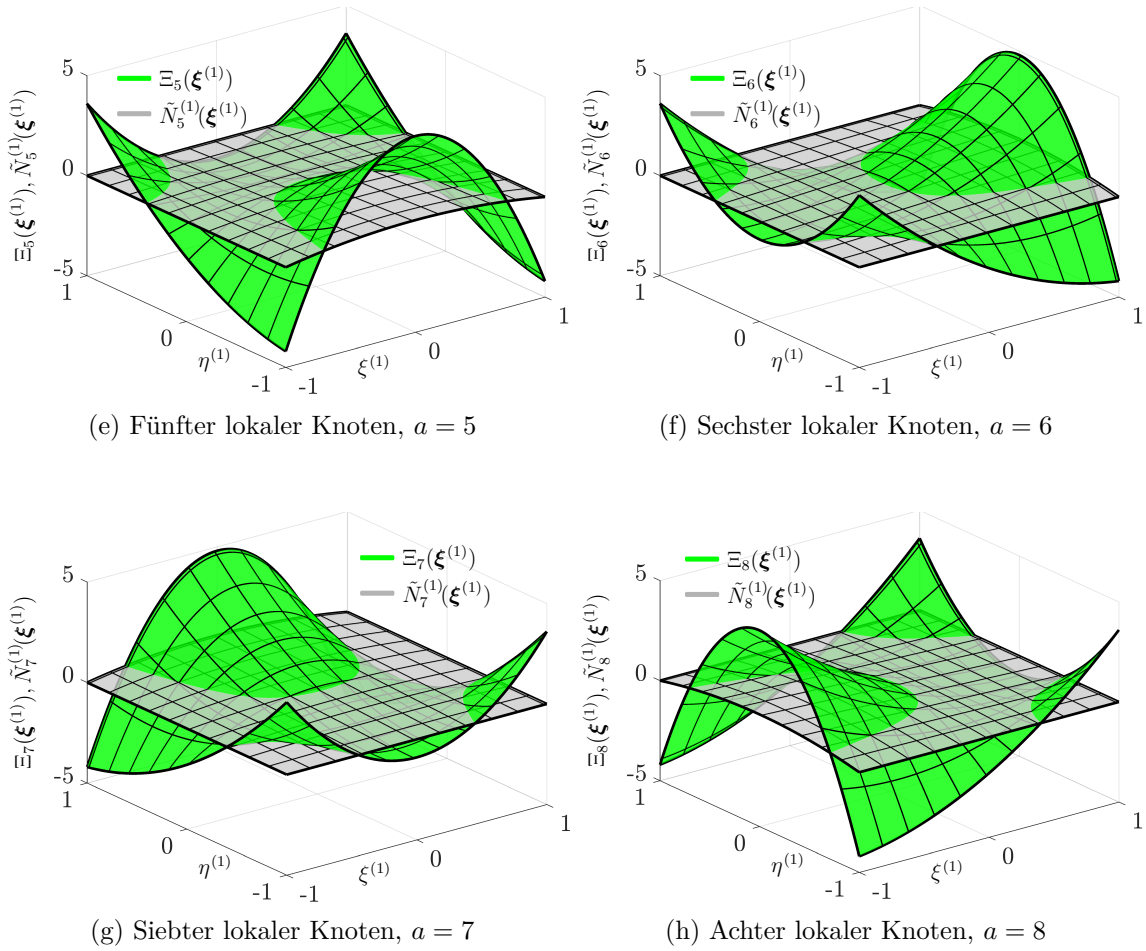


Abbildung C.12: Fortsetzung: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, mit basistransformierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\xi^{(1)})$, $a = 1, \dots, 8$, für ein unverzerrtes 8-knotiges quadratisches Viereck-Element (Quad8)

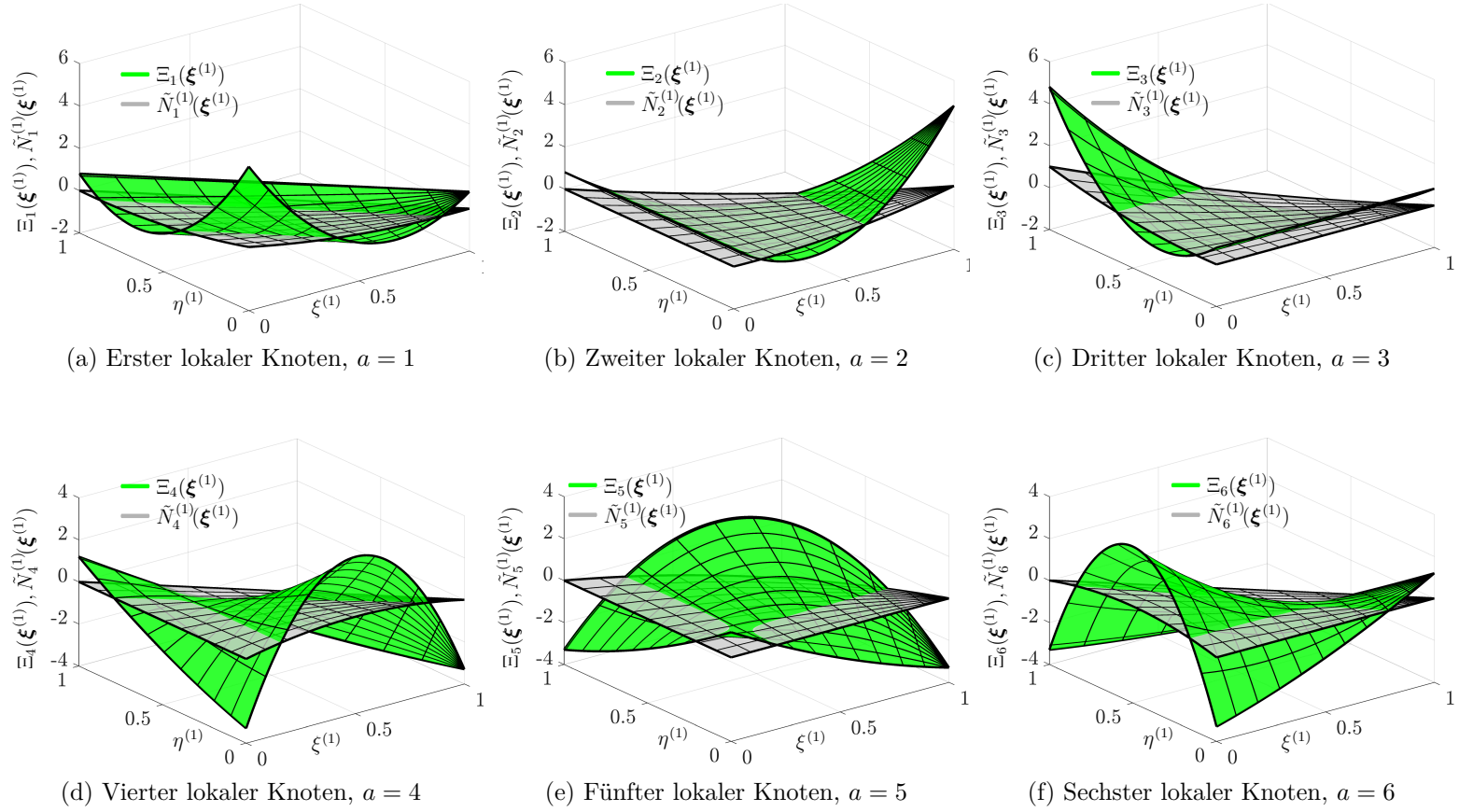


Abbildung C.13: Vergleich von dualen Lagrange-Multiplikator Ansatzfunktionen $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 6$, mit basistransformierten Ansatzfunktionen $\tilde{N}_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, 6$, für ein unverzerrtes 6-knotiges quadratisches Dreieck-Element (Tri6)

C.4 Konsistente Linearisierung der Mortar-basierten Finite-Elemente-Methode

Der folgende Abschnitt dient dazu, die verallgemeinert formulierten konsistenten Linearisierungsausdrücke aus Abschnitt 5.7 in Bezug auf die zum Einsatz kommende Mortar-basierte Finite-Elemente-Methode zu präzisieren. Für diese Aufgabe wird in der vorliegenden Arbeit das Konzept der Richtungsableitung verwendet. Es sei vorweggenommen, dass sämtliche mit der mortar-basierten Kontaktformulierung verknüpften Richtungsableitungen einen signifikanten Implementationsaufwand implizieren. Außerdem wird im Folgenden zur Verkürzung der Notation der globale Iterationsindex (m) ausgeblendet.

Die kontinuierlichen Normalen- und Tangentialvektorfelder bzw. die im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ konstruierte Orthonormalbasis haben essentiellen Anteil an der vorgestellten mortar-basierten Kontaktdiskretisierung. Dies hat zur Folge, dass deren konsistenten Linearisierungen in Abschnitt C.4.1 die Grundlage für die weiteren Ausführungen bilden. Hieran schließt sich eine implementationsnahe Generierung der Richtungsableitungen für die globalen Mortar-Matrizen

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}) = \sum_{r \in \mathcal{S}, s \in \mathcal{S}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U}) \mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{U}) = \sum_{r \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{M}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U}) \mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}},$$

in Abschnitt C.4.4 an.

Zur Berechnung einer adäquaten Komponentendarstellung in Gestalt von

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad \text{und} \quad \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$$

müssen allerdings zunächst entsprechende Linearisierungsvorschriften für die verschiedenen Segmentierungs- und Integrationsprozeduren in 2D und 3D erarbeitet werden. Im Fall einer Lagrange-Multiplikator Interpolation mit dualen Ansatzfunktionen sind auch die zugehörigen Formfunktionen innerhalb des Linearisierungsprozesses zu berücksichtigen. Auf Basis der Richtungsableitungen für die fundamentalen Mortar-Integrale \hat{D}_{rs} und \hat{M}_{rt} lassen sich abschließend Funktionaloperatoren für die Kinematikgrößen des Interface \tilde{g}_r und $\tilde{\mathbf{V}}_{Tr}$ angeben.

Um die Darstellungen des folgenden Abschnitts so kompakt wie möglich zu halten, wird weitestgehend auf umfangreiche Herleitungen verzichtet. Ähnliche Darstellungen zur konsistenten Linearisierung einer mortar-basierten Kontaktdiskretisierung finden sich beispielsweise auch in [Popp et al., 2009; Popp et al., 2010; Gitterle et al., 2010; Popp, 2012; Puso und Laursen, 2004a; Puso und Laursen, 2004b].

C.4.1 Konsistente Linearisierung der Normal- und Tangentenvektoren

Im folgenden Abschnitt soll die Linearisierung des gemittelten Normalenvektors \mathbf{n}_s sowie dessen zugehörigen orthonormierten Tangentialvektoren $\boldsymbol{\tau}_{\xi s}$ und $\boldsymbol{\tau}_{\eta s}$ für einen Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ an der aktuellen Position $\mathbf{x}_s^{(1)} = \mathbf{X}_s^{(1)} + \mathbf{U}_s^{(1)}$ beschrieben werden. In einem zweidimensionalen Kontext entfällt der zuletzt genannte Tangentialvektor.

Konsistente Linearisierung der Normal- und Tangentenvektoren in 3D Den Differentiationsprozess beginnend mit der Richtungsableitung des gemittelten Normalenvektors $\mathbf{n}_s \in \mathbb{R}^3$, siehe Gl. (5.345)₁, in Bezug auf den nicht normierten Spaltenvektor $\hat{\mathbf{n}}_s$ führt auf

$$D\mathbf{n}_s[\Delta\hat{\mathbf{n}}_s] = \mathbf{A}_{n_s}\Delta\hat{\mathbf{n}}_s \quad \forall s \in \mathcal{S}, \quad (\text{C.30})$$

mit dem Projektionsoperator

$$\mathbf{A}_{n_s} = \frac{1}{\|\hat{\mathbf{n}}_s\|} \left[\mathbf{I} - [\mathbf{n}_s \mathbf{n}_s^T] \right] \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \quad \text{und dem Differential} \quad D\hat{\mathbf{n}}_s[\Delta\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}] = \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \Delta\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}. \quad (\text{C.31})$$

Die dreidimensionale Einheitsmatrix wird in Gl. (C.31)₁ durch $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ symbolisiert. Der als Abkürzung eingeführte Normalenvektor $\hat{\mathbf{n}}_s \in \mathbb{R}^3$ setzt sich aus einer Summe von einzelnen Elementnormalen $\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|} \in \mathbb{R}^3$ der im Slave-Knoten $s \in \mathcal{S}$ angrenzenden Elemente $\tilde{e} = 1, \dots, n_s^{\text{adj}}$ zusammen, siehe Gl. (5.345)₂. Deren Linearisierung in Bezug auf die Verschiebungsfreiheitsgrade eines Elements liefert

$$\begin{aligned} D\mathbf{n}_s^{|\tilde{e}|}[\Delta\mathbf{u}^{e(1)}] &= \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|} \times \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\eta}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_s^{(1)}) \Delta\mathbf{u}_a^{e(1)} \right\} - \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|} \times \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_s^{(1)}) \Delta\mathbf{u}_a^{e(1)} \right\} \\ &= \mathbf{W}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|} \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\eta}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_s^{(1)}) \Delta\mathbf{u}_a^{e(1)} \right\} - \mathbf{W}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|} \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_s^{(1)}) \Delta\mathbf{u}_a^{e(1)} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

In Anlehnung an Puso und Laursen [2004a] werden die Kreuzprodukte in Gl. (C.32) als lineare Abbildungen der schiefsymmetrischen Matrizen $\mathbf{W}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und $\mathbf{W}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ umgeschrieben. Unter Verwendung des in Abschnitt A.1 eingeführten Matrixoperators $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{w})$ sind die schiefsymmetrischen Matrizen definiert als

$$\mathbf{W}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|} = \boldsymbol{\Omega}(\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|}) \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \quad \text{und} \quad \mathbf{W}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|} = \boldsymbol{\Omega}(\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|}) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}. \quad (\text{C.33})$$

Aus der Rücksubstitution der Gleichungen (C.31) und (C.32) in den Ausdruck (C.30) resultiert

$$D\mathbf{n}_s[\Delta\mathbf{U}] = \mathbf{A}_{n_s} \left\{ \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \mathbf{W}_{\xi_s}^{|\tilde{e}|} \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\eta}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_s^{(1)}) \Delta\mathbf{u}_a^{e(1)} \right\} - \mathbf{W}_{\eta_s}^{|\tilde{e}|} \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_s^{(1)}) \Delta\mathbf{u}_a^{e(1)} \right\} \right\}. \quad (\text{C.34})$$

Für eine Darstellung der Linearisierung des Tangentialvektors $\boldsymbol{\tau}_{\xi_s} \in \mathbb{R}^3$, basierend auf elementaren Ableitungsschritten, ist es zunächst zweckmäßig, die in Gl. (5.352) angegebene Berechnungsvorschrift in

$$\boldsymbol{\tau}_{\xi_s} = \frac{\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}}{\|\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}\|}, \quad \text{mit} \quad \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s} = \mathbf{P}_{n_s} \mathbf{c}_s^{[1]}, \quad \mathbf{P}_{n_s} = [\mathbf{I} - [\mathbf{n}_s \mathbf{n}_s^T]], \quad \mathbf{c}_s^{[1]} = \mathbf{x}_c^{[1]} - \mathbf{x}_s^{(1)}, \quad (\text{C.35})$$

zu reformieren. Der Differentiationsprozess für $\boldsymbol{\tau}_{\xi s} \in \mathbb{R}^3$ wird eingeleitet durch die Bestimmung der Richtungsableitung nach dem in die Tangentialebene projizierten Hilfsvektor $\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s} \in \mathbb{R}^3$. Damit ergibt sich

$$D\boldsymbol{\tau}_{\xi s}[\Delta\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}] = \mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau}_{\xi s}} \Delta\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau}_{\xi s}} = \frac{1}{\|\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}\|} \left[\mathbf{I} - [\boldsymbol{\tau}_{\xi s} \boldsymbol{\tau}_{\xi s}^T] \right] \in \mathbb{R}^{3 \times 3}. \quad (\text{C.36})$$

Die Linearisierung des geometrischen Zentrums $\mathbf{x}_c^{[1]} \in \mathbb{R}^3$ von $\tilde{e} = 1$ in Bezug auf die Elementverschiebungen resultiert in

$$D\mathbf{x}_c^{[1]}[\Delta\mathbf{u}^{e(1)}] = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\mathbf{0}) \Delta\mathbf{u}_a^{e(1)}, \quad (\text{C.37})$$

sodass in Kombination mit der Definition (C.35)₂ für $\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s} \in \mathbb{R}^3$ und Gl. (C.34) das Gateaux-Differential

$$D\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}[\Delta\mathbf{U}] = \mathbf{P}_{n_s} \left\{ D\mathbf{x}_c^{[1]}[\Delta\mathbf{U}] - \Delta\mathbf{U}_s^{(1)} \right\} - \left[(\mathbf{n}_s^T \mathbf{c}_s^{[1]}) \mathbf{I} - [\mathbf{n}_s \mathbf{c}_s^{[1]T}] \right] D\mathbf{n}_s[\Delta\mathbf{U}] \quad (\text{C.38})$$

hervorgeht. Hierbei repräsentiert $D\mathbf{x}_c^{[1]}[\Delta\mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$ das globale Pendant zur lokalen Richtungsableitung $D\mathbf{x}_c^{[1]}[\Delta\mathbf{u}^{e(1)}] \in \mathbb{R}^3$. Durch Applikation entsprechender Filteroperationen ergibt sich $D\mathbf{x}_c^{[1]}[\Delta\mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$ unmittelbar aus Gl. (C.37). Die der Knotenverschiebung $\mathbf{U}_s^{(1)} \in \mathbb{R}^3$ des Slave-Knotens $s \in \mathcal{S}$ zugeordnete inkrementelle Änderung wird durch $\Delta\mathbf{U}_s^{(1)} \in \mathbb{R}^3$ symbolisiert. Rückwärtseinsetzen des Ausdrucks in Gl. (C.36) induziert schließlich die benötigte Ableitung

$$D\boldsymbol{\tau}_{\xi s}[\Delta\mathbf{U}] = \mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau}_{\xi s}} \left\{ \mathbf{P}_{n_s} \left\{ D\mathbf{x}_c^{[1]}[\Delta\mathbf{U}] - \Delta\mathbf{U}_s^{(1)} \right\} - \left[(\mathbf{n}_s^T \mathbf{c}_s^{[1]}) \mathbf{I} - [\mathbf{n}_s \mathbf{c}_s^{[1]T}] \right] D\mathbf{n}_s[\Delta\mathbf{U}] \right\}. \quad (\text{C.39})$$

Unter Berücksichtigung von Gl. (5.349)₁ lässt sich die Linearisierung für den zweiten Tangentenvektor $\boldsymbol{\tau}_{\eta s} \in \mathbb{R}^3$ trivialerweise durch

$$\begin{aligned} D\boldsymbol{\tau}_{\eta s}[\Delta\mathbf{U}] &= \mathbf{n}_s \times D\boldsymbol{\tau}_{\xi s}[\Delta\mathbf{U}] - \boldsymbol{\tau}_{\xi s} \times D\mathbf{n}_s[\Delta\mathbf{U}] \\ &= \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{n}_s) D\boldsymbol{\tau}_{\xi s}[\Delta\mathbf{U}] - \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\tau}_{\xi s}) D\mathbf{n}_s[\Delta\mathbf{U}], \end{aligned} \quad (\text{C.40})$$

mit den schiefsymmetrischen Matrizen $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{n}_s) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\tau}_{\xi s}) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ angeben.

Konsistente Linearisierung der Normal- und Tangentenvektoren in 2D Für den zweidimensionalen Fall ist es effizienter, den Linearisierungsprozess für $\mathbf{n}_s \in \mathbb{R}^2$ und $\boldsymbol{\tau}_{\xi s} \in \mathbb{R}^2$ auf dem nicht normierten Tangentialvektor

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s} = \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi s}^{|\tilde{e}|} \in \mathbb{R}^2, \quad s \in \mathcal{S}, \quad (\text{C.41})$$

aufzubauen. Beginnend mit der Bestimmung der Richtungsableitung von Gl. (5.386) unter Einbindung der soeben angeführten Definition (C.41) für $\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s} \in \mathbb{R}^2$ folgt

$$D\mathbf{n}_s[\Delta \mathbf{U}] = \mathbf{A}_{\mathbf{n}_s} \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} D\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}[\Delta \mathbf{U}], \quad \text{mit } D\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}[\Delta \mathbf{U}] = \sum_{\tilde{e}=1}^{n_s^{\text{adj}}} \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_s^{(1)}) \Delta \mathbf{u}_a^{e(1)}. \quad (\text{C.42})$$

Während die knotenspezifische Matrix $\mathbf{A}_{\mathbf{n}_s} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ bereits in Gl. (C.31)₁ präzisiert wurde, ist die schiefsymmetrische Matrix $\mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, welche eine fixe Rotation von 90° um die Achse in Richtung von $\mathbf{e}_3 = \{0, 0, 1\}^T$ beschreibt, definiert als

$$\mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} = \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{e}_3) = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{mit der Eigenschaft } \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} = -\mathbf{W}_{\mathbf{e}_3}^T, \quad (\text{C.43})$$

siehe hierzu auch [Wriggers, 2008]. Der Vollständigkeit halber sei angemerkt, dass sich die Dimensionen der in Gl. (C.31)₁ in Erscheinung tretenden Matrizen und Vektoren für den 2D-Fall auf $\mathbf{A}_{\mathbf{n}_s} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, $\hat{\mathbf{n}}_s \in \mathbb{R}^2$ und $\mathbf{n}_s \in \mathbb{R}^2$ reduzieren. Unter Ausnutzen der Identität

$$\mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau}_{\xi_s}} = -\mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \mathbf{A}_{\mathbf{n}_s} \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} = \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3}^T \mathbf{A}_{\mathbf{n}_s} \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} = \frac{1}{\|\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}\|} \left[\mathbf{I} - [\boldsymbol{\tau}_{\xi_s} \boldsymbol{\tau}_{\xi_s}^T] \right] \quad (\text{C.44})$$

gelingt es, die Richtungsableitung

$$D\boldsymbol{\tau}_{\xi_s}[\Delta \mathbf{U}] = -\mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} D\mathbf{n}_s[\Delta \mathbf{U}] = \mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau}_{\xi_s}} D\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\xi_s}[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.45})$$

für den Tangentenvektoren $\boldsymbol{\tau}_{\xi_s} \in \mathbb{R}^2$, siehe Definition (5.387), zu spezifizieren. Ein identisches Resultat würde die Linearisierung des Ausdrucks (5.388) liefern.

C.4.2 Konsistente Linearisierung der mortar-basierten Segmentierungsstrategie

C.4.2.1 Konsistente Linearisierung der mortar-basierten Segmentierungsstrategie in 3D

Unter Beibehaltung der Reihenfolge des in Abschnitt 5.5.2 beschriebenen dreidimensionalen Mortar-Kopplungsalgorithmus 5.1 wird die konsistente Linearisierung der Mortar-Integrale in einer hierarchischen Struktur entwickelt.

Konsistente Linearisierung des geometrischen Zentrums Die konsistente Linearisierung des geometrischen Zentrums $\mathbf{x}_0^{(1)} \in \mathbb{R}^3$ von e_s , siehe Gl. (5.354), ist absolut trivial und lautet

$$D_{\mathbf{U}} \mathbf{x}_0^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_0^{(1)}) \Delta \mathbf{u}_a^{e(1)}, \quad (\text{C.46})$$

mit $\boldsymbol{\xi}_0^{(1)} = \{\xi_0^{(1)}, \eta_0^{(1)}\}^T = \mathbf{0}$.

Konsistente Linearisierung des geometrischen Zentrums Zur Projektion des Elementpaares (e_S, e_M) in die Hilfsebene wird der in $\mathbf{x}_0^{(1)} \in \mathbb{R}^3$ definierte Normaleneinheitsvektor $\mathbf{n}_0 \in \mathbb{R}^3$, siehe Gl. (5.355), herangezogen. Mit Blick auf den Ausdruck (C.30) ist damit die verschiebungsbezogene Richtungsableitung von $\mathbf{n}_0 \in \mathbb{R}^3$ festgelegt als

$$D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_0(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = \frac{1}{\left\| \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_0^{(1)}) \mathbf{n}_a \right\|} \left[\mathbf{I} - [\mathbf{n}_0 \mathbf{n}_0^T] \right] \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_0^{(1)}) D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_a(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}], \quad (\text{C.47})$$

wobei $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ die Einheitsmatrix im \mathbb{R}^3 und $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_a(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$ das Gateaux-Differential des im Slave-Knoten a , $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, errichteten Normalenvektors $\mathbf{n}_a \in \mathbb{R}^3$ symbolisieren. Eine entsprechende Zuordnung von $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_a(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, zu dem globalen Gegenstück $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_s(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^2$, $s \in \mathcal{S}$, gelingt, indem der auf das Slave-Element e_S bezogene lokale Knotenindex a mit einem entsprechenden globalen Index aus \mathcal{S} verknüpft wird. Auf die Nachbildung dieses Vorgangs mittels zusätzlicher Koinzidenzstrukturen soll im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht eingegangen werden.

Konsistente Linearisierung der in Hilfsebene projizierten Elementkoordinaten Zur Entfernung des Gestaltverzugs der sich überlagernden Facetten werden die jeweiligen Knoten der Elemente e_S und e_M in die konstruierte Hilfsebene projiziert. Dies geschieht mittels der allgemeinen Projektionsformel

$$\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(i)} = \mathbf{x}_a^{e(i)} - \left(\left\{ \mathbf{x}_a^{e(i)} - \mathbf{x}_0^{(1)} \right\}^T \mathbf{n}_0 \right) \mathbf{n}_0, \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(i)}, \quad i = 1, 2. \quad (\text{C.48})$$

Eine entsprechende konsistente Linearisierung der projizierten Elementkoordinaten $\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(i)} \in \mathbb{R}^3$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(i)}$, $i = 1, 2$, mündet dann in dem folgenden Ausdruck

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_a^{e(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = \left[\mathbf{I} - [\mathbf{n}_0 \mathbf{n}_0^T] \right] \Delta \mathbf{u}_a^{e(i)} + [\mathbf{n}_0 \mathbf{n}_0^T] D_{\mathbf{U}} \mathbf{x}_0^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - \left[[\mathbf{n}_0 \{ \mathbf{x}_a^{e(i)} - \mathbf{x}_0^{(1)} \}^T] + (\mathbf{n}_0^T \{ \mathbf{x}_a^{e(i)} - \mathbf{x}_0^{(1)} \}) \right] D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_0(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.49})$$

für $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(i)}$ und $i = 1, 2$.

Konsistente Linearisierung der Eckpunkte einer Integrationszelle Wie bereits in Abschnitt 5.5.2 erwähnt, ist die Zerlegung des aus dem überlappenden Slave-Master-Elementpaar (e_S, e_M) gebildeten Überschneidungspolygons in dreieckförmige Integrationszellen, mit den Ecken $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} \in \mathbb{R}^3$, $\mu = 1, \dots, 3$, das Resultat einer ausgefeilten Segmentierungsstrategie basierend auf Projektion- und Clipping-Operationen sowie einer Triangulierung. Alle relevanten Details zu den beiden letzten Prozessschritten sind Abschnitt C.2 zu entnehmen. Da der Eckpunkt einer Integrationszelle $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$, $\mu = 1, \dots, 3$, seinen Ursprung in einem der vier in Anhang C.2 beschriebenen Standardfällen haben kann, müssen auch entsprechende Fallunterscheidungen bei der konsistenten Linearisierung von $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$, $\mu = 1, \dots, 3$, beachtet werden. So implizieren die Standardfälle (I) und

(II), welche $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$ als Projektion eines Slave- oder Master-Knotens deklarieren, die Identität der Richtungsableitung $D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3$ mit Gl. (C.49), d. h.

$$D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] = D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(i)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}]. \quad (\text{C.50})$$

Eine weitere Möglichkeit für die Konstruktion eines Eckpunktes der Integrationszelle stellt der Standardfall (III), in dem $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$ im Rahmen des angewendeten Linien-Clipping-Algorithmus das Resultat einer parametrischen Schnittpunktberechnung ist, dar. Für die Konstellation eines durch $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} \in \mathbb{R}^3$ und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} \in \mathbb{R}^3$ begrenzten Liniensegments und einer Kante des Clipping-Fensters, mit den Enden $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)} \in \mathbb{R}^3$ und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} \in \mathbb{R}^3$, bestimmt sich der Schnittpunkt $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} = \tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}$ gemäß der Berechnungsvorschrift (C.14). Die konsistente Linearisierung von $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}$ lautet dann

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] &= D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] = \\ &D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] + s_{\text{int}}^{(2)} \left\{ D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] \right\} \\ &\quad + \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} \right\} D_{\mathbf{U}}s_{\text{int}}^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}], \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

mit der Richtungsableitung der parametrischen Schnittpunktcoordinate

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}}s_{\text{int}}^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] &= \frac{1}{d} \left(\mathbf{a}_1^T \left\{ D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] \right\} \right. \\ &\quad \left. + s_{\text{int}}^{(2)} \mathbf{b}_1^T \left\{ D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] \right\} \right. \\ &\quad \left. + \{ \mathbf{a}_2 + s_{\text{int}}^{(2)} \mathbf{b}_2^T \}^T \left\{ D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] \right\} \right. \\ &\quad \left. + \{ \mathbf{a}_3 + s_{\text{int}}^{(2)} \mathbf{b}_3^T \}^T D_{\mathbf{U}}\mathbf{n}_0(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] \right) \end{aligned}$$

und den Abkürzungen $d = -(\mathbf{n}_0^T \mathbf{b}_3)$,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \{ \tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)} \} \times \mathbf{n}_0, \quad \mathbf{a}_2 = \mathbf{n}_0 \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)} \}, \quad \mathbf{a}_3 = \{ \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)} \} \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)} \}, \\ \mathbf{b}_1 &= \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{b}_2 = \mathbf{n}_0 \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} \}, \quad \mathbf{b}_3 = \{ \tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(2)} \} \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)} \}. \end{aligned}$$

Wegen der direkten Zuordnung der mit dem Linien-Clipping-Algorithmus assoziierten Koordinaten $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(i)}$, $i = 1, 2$, und $\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(i)}$, $i = 1, 2$, zu den projizierten Elementkoordinaten $\tilde{\mathbf{x}}_a^{e(i)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(i)}$, $i = 1, 2$, folgen die Gateaux-Differentiale $D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}]$, $i = 1, 2$, und $D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}]$, $i = 1, 2$, unmittelbar aus Gl. (C.49). Darüber hinaus hält der Standardfall (III) eine zusätzliche Fallunterscheidung bereit. Für eine vollständige Bestimmung aller Ecken des Überschneidungspolygons ist es erforderlich, die zugewiesenen Rollen von Clipping-Fenster und Liniensegmenten zu vertauschen. Die hierdurch induzierte Anpassung der Berechnungsvorschrift, siehe Gl. (C.15), hat die folgende konsistente Linearisierung für $\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}} = \tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}$ zur Folge:

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\mu^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] &= D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] = \\ &D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] + s_{\text{int}}^{(1)} \left\{ D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}] \right\} \\ &\quad + \left\{ \tilde{\mathbf{x}}_\beta^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_\alpha^{(1)} \right\} D_{\mathbf{U}}s_{\text{int}}^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta\mathbf{U}], \end{aligned} \quad (\text{C.52})$$

mit der Richtungsableitung der parametrischen Schnittpunktcoordinate

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} s_{\text{int}}^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \frac{1}{d} \left(\mathbf{a}_1^T \{ D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \} \right. \\ &\quad + s_{\text{int}}^{(1)} \mathbf{b}_1^T \{ D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \} \\ &\quad + \{ \mathbf{a}_2 + s_{\text{int}}^{(1)} \mathbf{b}_2^T \}^T \{ D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \} \\ &\quad \left. + \{ \mathbf{a}_3 + s_{\text{int}}^{(1)} \mathbf{b}_3^T \}^T D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_0(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right), \end{aligned}$$

und den Abkürzungen $d = -(\mathbf{n}_0^T \mathbf{b}_3)$,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \} \times \mathbf{n}_0, & \mathbf{a}_2 &= \mathbf{n}_0 \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \}, & \mathbf{a}_3 &= \{ \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \} \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \}, \\ \mathbf{b}_1 &= \mathbf{a}_1, & \mathbf{b}_2 &= \mathbf{n}_0 \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} \}, & \mathbf{b}_3 &= \{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(1)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(1)} \} \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_{\beta}^{(2)} - \tilde{\mathbf{x}}_{\alpha}^{(2)} \} \end{aligned}$$

Die dreieckförmigen Integrationszellen werden durch eine einfache Triangulierung auf Basis des geometrischen Zentrums des Überschneidungspolygons $\tilde{\mathbf{x}}_{\text{c}} \in \mathbb{R}^3$, in dem sich sämtliche Dreiecke überlappen, gebildet. Die Lokalisation von $\tilde{\mathbf{x}}_{\text{c}} = 1/n_{\text{cell}} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}$ geschieht in Gestalt einer einfachen arithmetischen Mittelwertbildung, mit den Eckpunkten des Überschneidungspolygons $\tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}$, $z = 1, \dots, n_{\text{cell}}$. Der verbleibende Standardfall (IV) definiert daher $\tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}$ als $\tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}} = \tilde{\mathbf{x}}_{\text{c}}$, sodass die zugehörige Richtungsableitung in Form der Beziehung

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\text{c}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = \frac{1}{n_{\text{cell}}} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.53})$$

vorliegt. Die Eckpunkte des Überschneidungspolygons $\tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}$, $z = 1, \dots, n_{\text{cell}}$, haben entweder ihren Ursprung als Schnittpunkt des angewendeten Linien-Clipping-Algorithmus, d. h. $\tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}} = \tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}$, oder als in die Hilfsebene projizierte Elementcoordinate, d. h. $\tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}} = \tilde{\mathbf{x}}_a^{e(i)}$. Unter Berücksichtigung dieses Sachverhalts gehen die Gateaux-Differentiale $D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$, $z = 1, \dots, n_{\text{cell}}$, aus dem Ausdruck

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_a^{e(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.54})$$

oder

$$D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_z^{\text{clp}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.55})$$

hervor.

Konsistente Linearisierung der Jacobi-Determinante einer Integrationszelle Ein rigoroses Resultat der in Abschnitt 5.5.2 beschriebenen dreidimensionalen Segmentierungsstrategie ist die Zerlegung des Kontakt-Interface in dreieckförmige Integrationszellen, mit den jeweils in globalen Koordinaten ausgedrückten Eckpunkten $\tilde{\mathbf{x}}_1^{\text{cell}}$, $\tilde{\mathbf{x}}_2^{\text{cell}}$ und $\tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}}$. Infolge der auf Grundlage von $\tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}$, $\mu = 1, 2, 3$, und den Standardansatzfunktionen $N_{\mu}^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}})$, $\mu = 1, 2, 3$, aufgestellten linearen Koordinatentransformation (5.359) zeichnet sich die am Quadraturpunkt $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, ausgewertete Jacobi-Determinante einer Integrationszelle $\det \mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)} := \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g)$ durch den konstanten Ausdruck $\mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)} = \| \{ \tilde{\mathbf{x}}_2^{\text{cell}} - \tilde{\mathbf{x}}_1^{\text{cell}} \} \times \{ \tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}} - \tilde{\mathbf{x}}_1^{\text{cell}} \} \| = \text{const.}$ aus. Die konsistente Linearisierung

von $\det \mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)}$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, in Bezug auf den aktuellen Deformationszustand reduziert sich daher im Wesentlichen auf die Bestimmung der im vorhergehenden Paragraphen erörterten Richtungsableitungen für die Eckpunkte einer Integrationszelle. Es ergibt sich der folgende Ausdruck

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = & \frac{\{\mathbf{c}_1 \times \mathbf{c}_2\}^T}{\|\mathbf{c}_1 \times \mathbf{c}_2\|} \left\{ \mathbf{W}_{\xi} \{D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_2^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]\} \right. \\ & \left. - \mathbf{W}_{\eta} \{D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_1^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]\} \right\}, \quad (\text{C.56}) \end{aligned}$$

mit den schiefsymmetrischen Operatoren $\mathbf{W}_{\xi} = \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{c}_1) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ und $\mathbf{W}_{\eta} = \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{c}_2) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, siehe Abschnitt A.1, sowie den Differenzvektoren $\mathbf{c}_1 = \tilde{\mathbf{x}}_1^{\text{cell}} - \tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}} \in \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{c}_2 = \tilde{\mathbf{x}}_2^{\text{cell}} - \tilde{\mathbf{x}}_3^{\text{cell}} \in \mathbb{R}^3$.

Konsistente Linearisierung der slave- und master-seitigen Quadraturpunkte Neben der gebietsweise stetigen Raumintegration für die Interfacegrößen setzt die in Abschnitt 5.5.2 beschriebene dreidimensionale Kopplungsstrategie implizit auch eine diskrete Version der Transformationsabbildung $\chi_{\gamma_c}^h : \gamma_c^{h(1)} \times \mathbb{I} \rightarrow \gamma_c^{h(2)}$ um. Letztere ermöglicht erst eine direkte Zuordnung zwischen ausgewerteten Größen auf der Slave- und Master-Seite vorzunehmen. Wie bereits in den Erläuterungen zu den einzelnen Schritten des Kopplungsalgorithmus 5.1 angemerkt, erfolgt die eigentliche numerische Umsetzung von $\chi_{\gamma_c}^h$ in Gestalt der Projektionsvorschriften (5.361) und (5.362). Unter Zuhilfenahme des Körperindex i , $i = 1, 2$, lassen sich diese auch in dem Ausdruck

$$\sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} \overbrace{N_a^{(i)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(i)}) \mathbf{x}_a^{e(i)} - d_g^{(i)} \mathbf{n}_0 - \tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}}}^{\chi_t^{e(i)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(i)})} = 0, \quad i = 1, 2 \quad (\text{C.57})$$

zusammenfassen. Hierbei werden die im Referenzgebiet der Integrationszelle Ω_{Δ} verteilten Quadraturpunkte $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g = \{\tilde{\xi}_g, \tilde{\eta}_g\}^T$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, mittels der diskreten impliziten Berechnungsvorschrift (C.57) in den Parameterraum des Slave- oder Master-Elements, also in die lokalen Koordinaten $\boldsymbol{\xi}_g^{(i)} = \{\xi_g^{(i)}, \eta_g^{(i)}\}^T = \chi_t^{\Delta(i)}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g)$, $i = 1, 2$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, abgebildet. Geometrisch verbirgt sich hinter Gl. (C.57) die orthogonale Projektion von $\tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}} = \chi_t^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) = \sum_{\mu=1}^3 N_{\mu}^{\text{cell}}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}$ entlang \mathbf{n}_0 zurück auf das Slave-Element e_S , mit den Knotenkoordinaten $\mathbf{x}_a^{e(1)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, oder die master-seitige Facette e_M , mit den Knoten $\mathbf{x}_a^{e(2)}$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}$. Im Allgemeinen stellt das minimale Distanzproblem (C.57) die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems in Abhängigkeit des unbekannten senkrechten Abstands $d_g^{(i)}$ von $\tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}}$ zu $\chi_t^{e(i)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(i)})$ und dem lokalen Koordinatenvektor $\boldsymbol{\xi}_g^{(i)} = \{\xi_g^{(i)}, \eta_g^{(i)}\}^T = \chi_t^{\Delta(i)}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g)$ dar. Das Bilden der zugehörigen Richtungsableitungen für die drei Unbekannten gelingt mittels impliziter Differentiation von Gl. (C.57) und

manifestiert sich in dem Ausdruck

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \\ D_{\mathbf{U}} d_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \end{Bmatrix} &= [\mathbf{L}_g^{(i)}]^{-1} \left\{ d_g^{(i)} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_0(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right. \\ &\quad \left. + D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(i)}} N_a^{(i)}(\xi_g^{(i)}) \Delta \mathbf{u}_a^{e(i)} \right\} \right\} \in \mathbb{R}^3, \quad i = 1, 2, \quad (\text{C.58}) \end{aligned}$$

mit dem zu invertierenden Operator

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_g^{(i)} &= \begin{bmatrix} \chi_{t,\xi}^{e(i)}(\xi_g^{(i)}) & \chi_{t,\eta}^{e(i)}(\xi_g^{(i)}) & -\mathbf{n}_0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \quad \text{sowie} \\ \chi_{t,\xi}^{e(i)}(\xi^{(i)}) &= \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(i)}} N_{a,\xi}^{(i)}(\xi^{(i)}) \mathbf{x}_a^{e(i)}, \quad \chi_{t,\eta}^{e(i)}(\xi^{(i)}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(i)}} N_{a,\eta}^{(i)}(\xi^{(i)}) \mathbf{x}_a^{e(i)}, \\ D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_g^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \sum_{\mu=1}^3 N_{\mu}^{\text{cell}}(\tilde{\xi}_g) D_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{x}}_{\mu}^{\text{cell}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^3, \\ D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \begin{Bmatrix} D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \\ D_{\mathbf{U}} \eta_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \end{Bmatrix} \in \mathbb{R}^2. \end{aligned}$$

C.4.2.2 Konsistente Linearisierung der mortar-basierten Segmentierungsstrategie in 2D

Konsistente Linearisierung der Segmentgrenzen Prinzipiell existieren im Rahmen der zum Einsatz kommenden zweidimensionalen Segmentierungsstrategie, siehe Abschnitt 5.5.3, jeweils zwei Möglichkeiten für den Ursprung der slave-seitigen Segmentenden $\xi_{\gamma}^{(1)}$, $\gamma = \alpha, \beta$, sowie der master-seitigen Segmentgrenzen $\xi_{\gamma}^{(2)}$, $\gamma = \alpha, \beta$, die zusammen ein Mortar-Kontakt-Segment im \mathbb{R}^2 definieren. So kann einerseits $\xi_{\gamma}^{(i)}$, $i = 1, 2$, $\gamma = \alpha, \beta$, mit einer natürlichen Knotenkoordinaten der identischen Facettenseite zusammenfallen, d. h. $\xi_{\gamma}^{(i)}$ nimmt den konstanten Wert $\xi_{\gamma}^{(i)} = -1$ oder $\xi_{\gamma}^{(i)} = 1$ an. Die Alternative stellt die Definition von $\xi_{\gamma}^{(i)}$, $i = 1, 2$, $\gamma = \alpha, \beta$, als lokalen Projektionspunkt eines Knotens des gegenüberliegenden Elements dar. Neben den variierenden Bestimmungsgleichungen für die slave-seitigen und master-seitigen Projektionen, siehe Gl. (5.389) und (5.390), muss so die zuvor erörterte Fallunterscheidung im Rahmen einer konsistenten Linearisierung der Segmentgrenzen Berücksichtigung finden.

Analog zur Verfahrensweise des zweidimensionalen Kopplungsalgorithmus 5.2 werden zunächst die Richtungsableitungen für die lokalen Berandungen $\xi_{\gamma}^{(2)}$, $\gamma = \alpha, \beta$, des Mortar-Kontakt-Segments auf der Facette e_M angegeben. Für den trivialen Fall, bei dem $\xi_{\gamma}^{(2)}$ mit einem Master-Knoten koinzident ist, gilt

$$D_{\mathbf{U}} \xi_{\gamma}^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = 0. \quad (\text{C.59})$$

Repräsentiert dagegen $\xi_{\gamma}^{(2)}$ auf dem Master-Element e_M , mit den Knoten $\mathbf{x}_a^{e(2)} = \mathbf{X}_a^{e(2)} + \mathbf{u}_a^{e(2)} \in \mathbb{R}^2$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}$, die natürliche Projektionskoordinate eines der Facette e_S

zugeordneten lokalen Slave-Knotens $\mathbf{x}_\gamma^{e(1)} = \mathbf{x}_\gamma^{e(1)} + \mathbf{u}_\gamma^{e(1)} \in \mathbb{R}^2$, ergibt sich durch implizite Differentiation von Gl. (5.389) die zugehörige Richtungsableitung zu

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \xi_\gamma^{(2)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = & -\frac{1}{\mathbf{n}_\gamma^T \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \chi_t^{e(2)}(\xi_\gamma^{(2)})} \left(\mathbf{n}_\gamma^T \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \left\{ \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(2)}} N_a^{(2)}(\xi_\gamma^{(2)}) \Delta \mathbf{u}_a^{e(2)} \right\} - \Delta \mathbf{u}_\gamma^{e(1)} \right\} \right. \\ & \left. - \left\{ \chi_t^{e(2)}(\xi_\gamma^{(2)}) - \mathbf{x}_\gamma^{e(1)} \right\}^T \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_\gamma(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right), \quad (\text{C.60}) \end{aligned}$$

mit der Koordinatenabbildung des Master-Elements $\chi_t^{e(2)}(\xi^{(2)}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(2)}} N_a^{(2)}(\xi^{(2)}) \mathbf{x}_a^{e(2)}$ und der bereits in Gl. (C.43)₁ deklarierten schiefsymmetrischen Matrix $\mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} = \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{e}_3) \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. Weiterhin kennzeichnen in Gl. (C.60) $\mathbf{n}_\gamma \in \mathbb{R}^2$ den im lokalen Slave-Knoten $\mathbf{x}_\gamma^{e(1)} \in \mathbb{R}^2$ errichteten Einheitsnormalenvektor und $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_\gamma(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^2$ dessen zugehörige Richtungsableitung. Die detaillierte Schilderung der Prozedur zur Berechnung der letzteren Größe ist Gegenstand von Abschnitt C.4.1. Eine entsprechende Zuordnung von $\mathbf{n}_\gamma \in \mathbb{R}^2$ und $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_\gamma(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^2$ zu den globalen Gegenstücken $\mathbf{n}_s \in \mathbb{R}^2$, $s \in \mathcal{S}$, und $D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_s(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \in \mathbb{R}^2$, $s \in \mathcal{S}$, gelingt, indem der auf das Slave-Element e_S bezogene lokale Knotenindex γ mit einem entsprechenden globalen Index aus \mathcal{S} verknüpft wird. Auf die Nachbildung dieses Vorgangs mittels zusätzlicher Koinzidenzstrukturen wird jedoch verzichtet.

Absolut konform lässt sich für die slave-seitigen Segmentenden $\xi_\gamma^{(1)}$, $\gamma = \alpha, \beta$, verfahren. Fällt die natürliche Koordinate $\xi_\gamma^{(1)}$ auf dem Slave-Element e_S mit einem Slave-Knoten zusammen, resultiert der einfache Ausdruck

$$D_{\mathbf{U}} \xi_\gamma^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = 0. \quad (\text{C.61})$$

Die Richtungsableitung für die alternative Möglichkeit lautet:

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \xi_\gamma^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = & \frac{1}{d} \left(\mathbf{n}^{eT}(\xi_\gamma^{(1)}) \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \left\{ \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_\gamma^{(1)}) \Delta \mathbf{u}_a^{e(1)} \right\} - \Delta \mathbf{u}_\gamma^{e(2)} \right\} \right. \\ & \left. - \mathbf{c}_\gamma^T \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi_\gamma^{(1)}) D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_a(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right\} \right), \quad (\text{C.62}) \end{aligned}$$

mit den selbsterklärenden Abkürzungen

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^e(\xi^{(1)}) &= \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi^{(1)}) \mathbf{n}_a, \quad \mathbf{n}_{,\xi}^e(\xi^{(1)}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\xi^{(1)}) \mathbf{n}_a, \\ \mathbf{c}_\gamma &= \chi_t^{e(1)}(\xi_\gamma^{(1)}) - \mathbf{x}_\gamma^{e(2)}, \quad \chi_t^{e(1)}(\xi^{(1)}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_a^{(1)}(\xi^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)}, \quad \chi_{t,\xi}^{e(1)}(\xi^{(1)}) = \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\xi^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)}, \\ d &= - \left(\mathbf{n}^{eT}(\xi_\gamma^{(1)}) \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \chi_{t,\xi}^{e(1)}(\xi_\gamma^{(1)}) + \mathbf{n}_{,\xi}^{eT}(\xi_\gamma^{(1)}) \mathbf{W}_{\mathbf{e}_3} \mathbf{c}_\gamma^T \right) \end{aligned}$$

Hierbei wird die Vorschrift (5.390) für die Projektion eines der Facette e_M zugeordneten lokalen Master-Knotens $\mathbf{x}_\gamma^{e(2)} = \mathbf{x}_\gamma^{e(2)} + \mathbf{u}_\gamma^{e(2)} \in \mathbb{R}^2$ auf das gegenüberüberliegende Slave-Element e_S , mit den Knoten $\mathbf{x}_a^{e(1)} = \mathbf{x}_a^{e(1)} + \mathbf{u}_a^{e(1)} \in \mathbb{R}^2$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, linearisiert.

Konsistente Linearisierung der slave- und master-seitigen Quadraturpunkte Auf Basis der im vorhergehenden Paragraphen bestimmten Richtungsableitungen für die Segmentgrenzen eines Mortar-Kontakt-Segments, siehe Gl. (C.59) bis (C.62), können nun entsprechende konsistente Linearisierungsvorschriften für die in den jeweiligen Parameterräumen der Elemente e_S und e_M residierenden Quadraturpunktkoordinaten $\xi_g^{(1)} = \chi_t^{\text{seg}(1)}(\tilde{\xi}_g)$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{seg}}$, und $\xi_g^{(2)} = \chi_t^{\text{seg}(2)}(\tilde{\xi}_g)$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{seg}}$, entwickelt werden. Die Ableitung der sowohl für die Facette e_S als auch für das Flächenelement e_M gültigen linearen Transformationsabbildung (5.391) resultiert direkt in

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \frac{1}{2}(1 - \tilde{\xi}_g) D_{\mathbf{U}} \xi_{\alpha}^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \\ &+ \frac{1}{2}(1 + \tilde{\xi}_g) D_{\mathbf{U}} \xi_{\beta}^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}], \quad i = 1, 2, \quad g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{seg}}. \end{aligned} \quad (\text{C.63})$$

Konsistente Linearisierung der Jacobi-Determinante eines Kontakt-Segments Zur Durchführung der räumlichen Integration im eindimensionalen Parameterraum des Mortar-Kontakt-Segments s , $s = 1, \dots, n_{\text{segs}}$, ist das Aufstellen der Jacobi-Determinante

$$\mathbf{J}_{\text{seg}}^{s(g)} := \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) = \det \mathbf{j}^{e(g)(1)} \frac{\xi_{\beta}^{(1)} - \xi_{\alpha}^{(1)}}{2}, \quad (\text{C.64})$$

mit der am Quadraturpunkt $\xi_g^{(1)} = \chi_t^{\text{seg}(1)}(\tilde{\xi}_g)$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{seg}}$, des Slave-Elements e_S ausgewerteten Funktionaldeterminante

$$\det \mathbf{j}^{e(g)(1)} := \det \mathbf{j}^{e(1)}(\xi_g^{(1)}) = \|\chi_{t,\xi}^{e(1)}(\xi_g^{(1)})\|, \quad (\text{C.65})$$

unerlässlich. Die direkte Anwendung der Produktregel auf Gl. (C.64) liefert das Resultat

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \mathbf{J}_{\text{seg}}^{s(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \frac{\xi_{\beta}^{(1)} - \xi_{\alpha}^{(1)}}{2} D_{\mathbf{U}} \det \mathbf{j}^{e(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \\ &+ \det \mathbf{j}^{e(g)(1)} \frac{D_{\mathbf{U}} \xi_{\beta}^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - D_{\mathbf{U}} \xi_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]}{2}, \end{aligned} \quad (\text{C.66})$$

wobei das Gateaux-Differential für $\det \mathbf{j}^{e(g)(1)}$ in Richtung der unbekannten Verschiebungen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$ in Gestalt des konsistenten Linearisierungsausdrucks

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \det \mathbf{j}^{e(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \left\{ \frac{\chi_{t,\xi}^{e(1)}(\xi_g^{(1)})}{\|\chi_{t,\xi}^{e(1)}(\xi_g^{(1)})\|} \right\}^T \left\{ \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi}^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \Delta \mathbf{u}_a^{e(1)} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \left\{ \sum_{a=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} N_{a,\xi\xi}^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \mathbf{x}_a^{e(1)} \right\} D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.67})$$

vorliegt. Der letzte Summandenterm in Gl. (C.67), in dem die zweiten Ableitungen der Ansatzfunktionen, also $N_{a,\xi\xi}^{(1)}(\xi_g^{(1)}) = d^2 N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)})/d\xi^2$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, involviert sind, ist lediglich im Fall einer quadratischen oder noch höheren Interpolationsordnung für $N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, mitzuführen. Für lineare Elemente entfällt dieser Term.

C.4.3 Konsistente Linearisierung der Ansatzfunktionen

Bevor eine algorithmische Realisierung von $D_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ und $D_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ angegeben werden kann, sind zunächst die Integranden der Mortar-Integrale, also die an den Quadraturpunkten $\boldsymbol{\xi}_g^{(i)} = \{\xi_g^{(i)}, \eta_g^{(i)}\}^T = \boldsymbol{\chi}_t^{\Delta(i)}(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g)$, $i = 1, 2$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, ausgewerteten Ansatzfunktionen $\Xi_a^{(g)} = \Xi_a(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, $N_a^{(g)(1)} := N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, und $N_a^{(g)(2)} := N_a^{(2)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(2)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}$, zu linearisieren. Für die Ansatzfunktionen zur Interpolation des Verschiebungsfeldes auf dem Slave-Element e_S bzw. dem Master-Element e_M resultieren im \mathbb{R}^3 die einfachen Richtungsableitungen

$$D_{\mathbf{U}} N_a^{(g)(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = \left\{ N_{a,\xi}^{(i)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(i)}), N_{a,\eta}^{(i)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(i)}) \right\} D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\xi}_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}], \quad i = 1, 2, \quad (\text{C.68})$$

wobei das Gateaux-Differential $D_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\xi}_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = \left\{ D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}], D_{\mathbf{U}} \eta_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right\}^T$ das Ergebnis der konsistenten Linearisierung der mortar-basierten Kontaktdiskretisierung, siehe Abschnitt C.4.2.1, repräsentiert. Ohne wesentliche konzeptionelle Änderungen ist Gl. (C.68) auch auf den zweidimensionalen Fall applizierbar. Gegen Austausch des vektorwertigen Charakters für $\boldsymbol{\xi}_g^{(i)}$ gilt

$$D_{\mathbf{U}} N_a^{(g)(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = N_{a,\xi}^{(1)}(\xi_g^{(1)}) D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}], \quad i = 1, 2, \quad (\text{C.69})$$

mit der in Gl. (C.63) definierten skalarwertigen Richtungsableitung $D_{\mathbf{U}} \xi_g^{(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sind zwei verschiedene Typen von Ansatzfunktionen, klassische bzw. duale Formfunktionen, zur Interpolation der Kontaktspannungen von Interesse. Eine Lagrange-Multiplikator Interpolation auf Basis von Standardansatzfunktionen mündet in der einfachen Identität $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}) = N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, sodass die konsistenten Linearisierungsformeln für $\Xi_a^{(g)} = \Xi_a(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) = N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)})$ unmittelbar aus den Beziehungen (C.68) und (C.69) für $i = 1$ übernommen werden können. Es gilt:

$$D_{\mathbf{U}} \Xi_a^{(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = D_{\mathbf{U}} N_a^{(g)(i)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.70})$$

Im Kontrast hierzu zeichnen sich die lokalen dualen Ansatzfunktionen eines Slave-Elements $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \mathbf{U})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, durch eine explizite Deformationsabhängigkeit, die in der gewählten Konstruktionssystematik von $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \mathbf{U})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, siehe Abschnitt 5.5.4.2 begründet liegt, aus. Eine direkte konsistente Linearisierung des an $\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}$, $g = 1, \dots, n_{\text{GP}}^{\text{cell}}$, ausgewerteten Linearkombinationsansatzes $\Xi_a^{(g)}(\mathbf{U}) := \Xi_a(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}, \mathbf{U}) = \sum_{b=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} a_{ab}^e(\mathbf{U}) N_b^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, siehe Gl. (5.413)₁, liefert

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \Xi_a^{(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \sum_{b=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} D_{\mathbf{U}} a_{ab}^e(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] N_b^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \\ &\quad + \sum_{b=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} a_{ab}^e D_{\mathbf{U}} N_b^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}], \quad a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}. \end{aligned} \quad (\text{C.71})$$

Im Vergleich zu Gl. (C.70) tritt nun in der Richtungsableitung der dualen Formfunktion (C.71) ein zusätzlicher Ableitungsterm in Bezug auf die deformationsabhängige Koeffizientenmatrix $\mathbf{A}^e(\mathbf{U}) = [a_{ab}^e](\mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ auf. Wie bereits eingehend in Abschnitt 5.5.4.2 erläutert, ergibt sich $\mathbf{A}^e(\mathbf{U})$ aus der Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{A}^e(\mathbf{U}) \mathbf{M}^e(\mathbf{U}) = \mathbf{D}^e(\mathbf{U}) \Leftrightarrow \mathbf{A}^e = \mathbf{D}^e \mathbf{M}^{e-1}, \quad \text{mit} \quad (\text{C.72})$$

$$\mathbf{D}^e = [d_{ab}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}, \quad \mathbf{M}^e = [m_{ab}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}} \quad \text{und} \quad \mathbf{M}^{e-1} = [m_{ab}^{e-1}] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}.$$

Weiterhin zeigen Popp et al. [2010] und Popp [2012], dass die Bildung der Richtungsableitung von \mathbf{A}^e durch Anwendung der Produktregel sowie unter Berücksichtigung der Beziehung

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{M}^{e-1} [\Delta \mathbf{M}^e] = -\mathbf{M}^{e-1} \Delta \mathbf{M}^e \mathbf{M}^{e-1}$$

in dem folgenden matriziellen Ausdruck

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{A}^e(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] = \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{D}^e(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] \mathbf{M}^{e-1} - \mathbf{A}^e \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{M}^e(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] \mathbf{M}^{e-1} \quad (\text{C.73})$$

mündet. Im Rahmen einer effizienten Implementation von Gl. (C.73) ist es sinnvoll, dreidimensionale Speicherformate zur Extrahierung der Funktionaloperatorform von $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{A}^e [\Delta \mathbf{M}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$, $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{D}^e [\Delta \mathbf{M}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ und $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{M}^e [\Delta \mathbf{M}^e] \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}$ heranzuziehen. Der die zugehörigen Funktionaloperatoren aufnehmende Speicherblock ist so zu organisieren, dass die an das Format gebundene multiplikative Verknüpfung mit einer $\mathbb{R}^{n \times n}$ -Matrix korrekt abgebildet wird. Konkretisiert am Beispiel der Koeffizientenmatrix \mathbf{A}^e bedeutet dies

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{A}^e [\Delta \mathbf{U}] = \Delta \mathbf{A}^e = \frac{d\mathbf{A}^e}{d\mathbf{U}} * \Delta \mathbf{U}.$$

Für eine eingängigere Betrachtung lässt sich Gl. (C.73) alternativ auch in die Komponentendarstellung

$$\mathbf{D}_{\mathbf{U}} a_{ab}^e(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] = \mathbf{D}_{\mathbf{U}} d_{aa}^e(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] m_{ab}^{e-1} - \sum_{c=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} \sum_{d=1}^{n_{\text{en}}^{(1)}} m_{ac}^{e-1} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} m_{cd}^e(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] m_{db}^{e-1}, \quad (\text{C.74})$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{A}^e [\Delta \mathbf{U}] &= \{ \mathbf{D}_{\mathbf{U}} a_{ab}^e [\Delta \mathbf{U}] \} \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}, \quad \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{D}^e [\Delta \mathbf{U}] = \{ \mathbf{D}_{\mathbf{U}} d_{ab}^e [\Delta \mathbf{U}] \} \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}}, \\ \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{M}^e [\Delta \mathbf{U}] &= \{ \mathbf{D}_{\mathbf{U}} m_{ab}^e [\Delta \mathbf{U}] \} \in \mathbb{R}^{n_{\text{en}}^{(1)} \times n_{\text{en}}^{(1)}} \end{aligned}$$

bringen. Gemäß der in Abschnitt 5.5.4.2 verabschiedeten Vereinbarung, dass in der vorliegenden Arbeit lediglich der segmentbasierte Konstruktionsansatz zur Berechnung von $\Xi_a(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \mathbf{U})$, $a = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$, Anwendung findet, werden zur Aggregation von \mathbf{D}^e und \mathbf{M}^e im \mathbb{R}^3 die Vorschriften (5.419) und (5.420) benutzt. In Verbindung mit den in Abschnitt C.4.2.1 definierten Richtungsableitungen resultieren damit die Gateaux-Differentiale

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} d_{ab}^e(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] &= \delta_{ab} \sum_{p=1}^{n_{\text{clp}}^{\text{es}}} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \left(\mathbf{D}_{\mathbf{U}} N_a^{(g)(1)}(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \right. \\ &\quad \left. + N_a^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)}(\mathbf{U}) [\Delta \mathbf{U}] \right) \quad (\text{C.75}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} m_{ab}^e(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = & \sum_{p=1}^{n_{\text{clip}}^e} \sum_{z=1}^{n_{\text{cell}}} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \left(D_{\mathbf{U}} N_a^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g) \right. \\ & + N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)}) D_{\mathbf{U}} N_b^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\xi}_g) \\ & \left. + N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)}) N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) D_{\mathbf{U}} \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right), \quad (\text{C.76}) \end{aligned}$$

welche die Linearisierungsprozedur für die dualen Ansatzfunktionen vervollständigen. Innerhalb eines zweidimensionalen Kontext müssen lediglich Gl. (C.75) und (C.76) gegen die folgenden Beziehungen

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} d_{ab}^e(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = & \delta_{ab} \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^e} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \left(D_{\mathbf{U}} N_a^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \right. \\ & \left. + N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)}) D_{\mathbf{U}} \mathbf{J}_{\text{seg}}^{s(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right), \quad (\text{C.77}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} m_{ab}^e(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = & \sum_{s=1}^{n_{\text{seg}}^e} \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \left(D_{\mathbf{U}} N_a^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \right. \\ & + N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)}) D_{\mathbf{U}} N_b^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \\ & \left. + N_a^{(1)}(\xi_g^{(1)}) N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) D_{\mathbf{U}} \mathbf{J}_{\text{seg}}^{s(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right), \quad (\text{C.78}) \end{aligned}$$

die auf den Aggregationsvorschriften (5.423) und (5.424) basieren, ausgetauscht werden. Die hierin involvierten Richtungsableitungen sind Abschnitt C.4.2.2 zu entnehmen.

Es offensichtlich, dass das extensive Verschachteln von Ableitungen einen hohen numerischen Berechnungsaufwand für das Aufstellungen der mit den dualen Ansatzfunktionen assoziierten Funktionaloperatoren nach sich zieht. Bei der Implementation der Linearisierungsausdrücke ist daher auf eine möglichst effiziente Umsetzung zu achten.

C.4.4 Konsistente Linearisierung der Mortar-Integrale

Nach Rekapitulation des eingangs von Abschnitt C.4 formulierten Vorhabens, nämlich der Berechnung der Richtungsableitungen für die globalen Mortar-Matrizen

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}) = \mathbf{A}_{r \in \mathcal{S}, s \in \mathcal{S}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U}) \mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{U}) = \mathbf{A}_{r \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{M}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U}) \mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}},$$

ist dieses unter Berücksichtigung der in den vorhergehenden Abschnitten angegebenen Beziehungen endlich umsetzbar.

Konsistente Linearisierung der Mortar-Integrale in 3D Wie eingehend in Abschn. 5.5.2 dargestellt, lassen sich die numerische Integration und die Assemblierung der globalen Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$ bis auf die lokale Ebene einer Integrationszelle herunterbrechen. Der beschriebene Sachverhalt wird durch die Berechnungsvorschriften (5.374) bis (5.379) ausgedrückt. Zur Entwicklung eingängiger konsistenter Linearisierungsanweisungen ist es jedoch zweckmäßig, die auf unterster Stufe angesiedelten, matriziell formulierten Quadraturschritte (5.377) und (5.379) in eine lokale knotenspezifische Komponentendarstellung, welche auf die lokale Knotenindexierung der Integrationszelle gestaltgebenden Slave-Master-Elementpaares (e_S, e_M) Bezug nimmt, zu überführen. Es gilt:

$$\hat{\mathbf{D}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{U}) = \left[\hat{D}_{ab}^z \mathbf{I}_3 \right] \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(1)}}, \quad \hat{\mathbf{M}}_{\text{cell}}^z(\mathbf{U}) = \left[\hat{M}_{ac}^z \mathbf{I}_3 \right] \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(2)}}, \quad \text{mit} \quad (\text{C.79})$$

$$\hat{D}_{ab}^z(\mathbf{U}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \Xi_a(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}, \mathbf{U}) N_b^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g), \quad (\text{C.80})$$

$$\hat{M}_{ac}^z(\mathbf{U}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \Xi_a(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}, \mathbf{U}) N_c^{(2)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \quad (\text{C.81})$$

Aus einer Zuordnung der lokalen Knotennummerierungen $a, b = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(1)}$ und $c = 1, \dots, n_{\text{en}}^{(2)}$ zu den entsprechenden globalen Indexierungen $r, s \in \mathcal{S}$ und $t \in \mathcal{M}$ sowie Aufsummation der einzelnen Beiträge $\hat{D}_{ab}^z(\mathbf{U})$ und $\hat{M}_{ac}^z(\mathbf{U})$ resultieren dann die globalen Gegenstücke $\hat{D}_{rs}(\mathbf{U})$ und $\hat{M}_{rt}(\mathbf{U})$. Die konsistente Linearisierung der Ausdrücke (C.80) und (C.81) gelingt schließlich mit Hilfe der Kettenregel und führt auf die Beziehungen

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{ab}^z(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \left(\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \Xi_a^{(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] N_b^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} N_b^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} N_b^{(1)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(1)}) \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right) \quad (\text{C.82}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{ac}^z(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{cell}}} \tilde{w}_g \left(\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \Xi_a^{(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] N_c^{(2)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} N_c^{(g)(2)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^z(\tilde{\boldsymbol{\xi}}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} N_c^{(2)}(\boldsymbol{\xi}_g^{(2)}) \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \det \mathbf{J}_{\text{cell}}^{z(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right). \quad (\text{C.83}) \end{aligned}$$

Eine detaillierte Herleitung zu den einzelnen Gateaux-Differentialen in den Gl. (C.82) und (C.83) findet sich in den Abschnitten C.4.2 und C.4.3. Der Zusammenbau der mit einer Integrationszelle assoziierten Beiträge $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{ab}^z(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ und $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{ac}^z(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ zu $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ und $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ verläuft absolut analog zu der weiter oben beschriebenen Assemblierungsprozedur der globalen Mortar-Integrale.

Konsistente Linearisierung der Mortar-Integrale in 2D Aufgrund einer im \mathbb{R}^2 an das vereinfachte Geometrieszenario angepassten Segmentierungsstrategie liegen nun die auf ein Kontakt-Segment (Interface-Element) heruntergebrochenen Quadraturschritte zur Berechnung einzelner Beiträge an den globalen Kopplungsmatrizen $\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uUS}} \times n_{\text{uUS}}}$ und $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{n_{\text{uUS}} \times n_{\text{uUM}}}$ in Gestalt der Beziehungen (5.399) und (5.400) vor. Ausgedrückt in einer lokalen knotenspezifischen Komponentendarstellung lauten diese Beziehungen:

$$\hat{\mathbf{D}}_{\text{seg}}^s(\mathbf{U}) = \left[\hat{D}_{ab}^s \mathbf{I}_2 \right] \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(1)}}, \quad \hat{\mathbf{M}}_{\text{seg}}^s(\mathbf{U}) = \left[\hat{M}_{ac}^s \mathbf{I}_2 \right] \in \mathbb{R}^{n_\lambda^e \times n_u^{e(2)}}, \quad \text{mit} \quad (\text{C.84})$$

$$\hat{D}_{ab}^s(\mathbf{U}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \Xi_a(\xi_g^{(1)}, \mathbf{U}) N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g), \quad (\text{C.85})$$

$$\hat{M}_{ac}^s(\mathbf{U}) = \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \Xi_a(\xi_g^{(1)}, \mathbf{U}) N_c^{(2)}(\xi_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \quad (\text{C.86})$$

Innerhalb eines zweidimensionalen Kontext sind somit die zugehörigen konsistenten Linearisierungen von $\hat{D}_{ab}^s(\mathbf{U})$ und $\hat{M}_{ac}^s(\mathbf{U})$ definiert als

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{ab}^s(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \left(\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \Xi_a^{(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} N_b^{(g)(1)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} N_b^{(1)}(\xi_g^{(1)}) \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{J}_{\text{seg}}^{s(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right) \quad (\text{C.87}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{ac}^s(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= \sum_{g=1}^{n_{\text{GP}}^{\text{seg}}} \tilde{w}_g \left(\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \Xi_a^{(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] N_c^{(2)}(\xi_g^{(2)}) \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} N_c^{(g)(2)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \det \mathbf{J}_{\text{seg}}^s(\tilde{\xi}_g) \right. \\ &\quad \left. + \Xi_a^{(g)} N_c^{(2)}(\xi_g^{(2)}) \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \mathbf{J}_{\text{seg}}^{s(g)}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right), \quad (\text{C.88}) \end{aligned}$$

deren Zusammenführung für die einzelnen Interface-Elemente schließlich in den benötigten globalen Richtungsableitungen $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ und $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ endet.

C.4.5 Konsistente Linearisierung der gewichteten Normalklaffung

Die an einem Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ definierte gewichte Normalklaffung $\tilde{g}_r(\mathbf{U})$, siehe Definition (5.325), ist im Rahmen der in der vorliegenden Arbeit präsentieren mortar-basierten Finite-Elemente-Methode eine fundamentale kinematische Interfacegröße, die es erlaubt, diskrete knotenspezifische Normalkontaktbedingungen (5.444) zu spezifizieren. Wie bereits in Abschnitt 5.7 dargelegt, verlangt die in diesem Unterkapitel vorgestellte iterative Lösungsprozedur vom Newton-Raphson-Typ nach einer inkrementellen Formulierung der zuletzt genannten Gleichungsstrukturen. Aus diesem Grund ist die hierin involvierte

Ableitung von $\tilde{g}_r(\mathbf{U})$, $r \in \mathcal{S}$, ein weiterer Baustein, den es zu ergänzen gilt. In Kombination mit den Richtungsableitungen der Mortar-Integrale sowie der Richtungsableitung des im Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ konstruierten Normalenvektors wird die konsistente Linearisierung der gewichteten Normalklaffung nach den Verschiebungen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ durch das Gateaux-Differential

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{U}} \tilde{g}_r(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] = & -\mathbf{n}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \mathbf{x}_s^{(1)} D_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - \sum_{t \in \mathcal{M}} \mathbf{x}_t^{(2)} D_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right\} \\ & - \mathbf{n}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs} \Delta \mathbf{U}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt} \Delta \mathbf{U}_t^{(2)} \right\} \\ & - \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \hat{\mathbf{D}}_{rs} \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \hat{\mathbf{M}}_{rt} \mathbf{x}_t^{(2)} \right\}^T D_{\mathbf{U}} \mathbf{n}_r(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.89}) \end{aligned}$$

wiedergegeben. Es ist zu beachten, dass die linearisierten normalen Kopplungsbedingungen (5.522) innerhalb des aktuellen globalen Iterationsschritts nur an den aktiven Slave-Knoten auszuwerten sind, sodass zumindest an den inaktiven Slave-Knoten die durch Gl. (C.89) induzierten aufwendigen Berechnungen entfallen.

C.4.6 Konsistente Linearisierung der gewichteten tangentialen Relativgeschwindigkeit

Zur Formulierung von ratenabhängigen, tangentialen Kontaktbedingungen wird auch eine ratenabhängige Beschreibung der Kinematik im Interface benötigt. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit übernimmt diese Aufgabe die als Komponentenvektor in Gl. (5.341) eingeführte Schlupfrate $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$, $r \in \mathcal{S}$. Die gewichtete tangentielle Relativgeschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}_{Tr}$, $r \in \mathcal{S}$ wird daraufhin in Abschnitt 5.6 der Zeitdiskretisierung mit einem diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) oder der Generalized- α Methode (Gen- α) unterworfen, woraus die in der Zeit parametrisierten Ausdrücke (5.469) und (5.471) hervorgehen. Zur Angleichung der Nomenklatur zwischen beiden Integratoren soll jedoch im Folgenden die zeitdiskretisierte Version

$$\tilde{\mathbf{v}}_{Tr} = -\boldsymbol{\tau}_r^T \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \frac{\hat{D}_{rs} - \hat{D}_{rs}^S}{\Delta \hat{t}} \mathbf{x}_s^{(1)} - \sum_{t \in \mathcal{M}} \frac{\hat{M}_{rt} - \hat{M}_{rt}^S}{\Delta \hat{t}} \mathbf{x}_t^{(2)} \right\}, \quad (\text{C.90})$$

mit dem gewichteten Zeitschritt $\Delta \hat{t}^9$ und den zur Bildung der Differenzenquotienten benötigten Startwerten \hat{D}_{rs}^S und \hat{M}_{rt}^S ,¹⁰ betrachtet werden. Ein entsprechender konsistenter

⁹Der gewichtete Zeitschritt $\Delta \hat{t}$ ist definiert als

$$\Delta \hat{t} = \begin{cases} \Delta t_n a_{ii} & (\text{DIRK}), \\ \Delta t_\alpha & (\text{Gen-}\alpha) \end{cases}.$$

¹⁰Die Startwerte für die Mortar-Integrale sind definiert als

$$\hat{D}_{rs}^S = \begin{cases} \hat{D}_{rs}^S|_{ni} & (\text{DIRK}), \\ \hat{D}_{rs}^S|_n & (\text{Gen-}\alpha) \end{cases} \quad \text{und} \quad \hat{M}_{rt}^S = \begin{cases} \hat{M}_{rt}^S|_{ni} & (\text{DIRK}), \\ \hat{M}_{rt}^S|_n & (\text{Gen-}\alpha) \end{cases}.$$

Linearisierungsausdruck für Gl. (C.90) lautet dann:

$$\begin{aligned} \Delta \hat{t} \, \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] &= -\boldsymbol{\tau}_r^{\text{T}} \left\{ \sum_{s \in \mathcal{S}} \mathbf{x}_s^{(1)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{D}_{rs}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] - \sum_{t \in \mathcal{M}} \mathbf{x}_t^{(2)} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \hat{M}_{rt}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \right\} \\ &\quad - \boldsymbol{\tau}_r^{\text{T}} \left\{ (\hat{D}_{rs} - \hat{D}_{rs}^{\text{S}}) \Delta \mathbf{U}_s^{(1)} - (\hat{M}_{rt} - \hat{M}_{rt}^{\text{S}}) \Delta \mathbf{U}_t^{(2)} \right\} \\ &\quad - \left\{ (\hat{D}_{rs} - \hat{D}_{rs}^{\text{S}}) \mathbf{x}_s^{(1)} - (\hat{M}_{rt} - \hat{M}_{rt}^{\text{S}}) \mathbf{x}_t^{(2)} \right\}^{\text{T}} \mathbf{D}_{\mathbf{U}} \boldsymbol{\tau}_r(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}] \quad (\text{C.91}) \end{aligned}$$

Aufgrund des hohen numerischen Ressourceneinsatzes zur Auswertung von Gl. (C.91) ist zu beachten, dass der aus der Richtungsableitung $\mathbf{D}_{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{v}}_{\text{Tr}}(\mathbf{U})[\Delta \mathbf{U}]$ extrahierte Funktionaloperator nur für einen aktiven Slave-Knoten innerhalb des iterativen Lösungsprozesses von Relevanz ist.

D Zeitdiskretisierung

Tab. D.1 zeigt eine Auflistung der in der vorliegenden Arbeit untersuchten bzw. angewendeten Einschrittverfahren. Neben den verwendeten Abkürzungen für die Integratoren und zugehörigen Referenzen können die theoretische Konvergenz- bzw. Konsistenzordnung p , siehe [Strehmel et al., 2012], sowie im konkreten Fall der Runge-Kutta Verfahren die Anzahl von Stufen s entnommen werden.

Tabelle D.1: Angewendete Einschrittverfahren im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen

Abk.	Verfahren	p	s	Referenz
DIRK/indirekte DIRKN				
BE	Impl. Euler-Verfahren	1	1	[Butcher, 2008]
Trapez/CAA	Trapezregel	2	2	[Hughes, 2000; Ellsiepen und Hartmann, 2001]
Alex2/Ell	Alexander/Ellsiepen	2	2	[Alexander, 1977; Ellsiepen, 1999]
Alex3/Cash	Alexander/Cash	3	3	[Alexander, 1977; Cash, 1979]
direkte DIRKN				
Sharp3	Sharp/Fine ($p=3$)	3	2	[Sharp et al., 1990]
Sharp4	Sharp/Fine ($p=4$)	4	3	[Sharp et al., 1990]
Generalized-α Methode				
Gen- α	Generalized- α Methode, $\rho_\infty = 0.8$	2	-	[Chung und Hulbert, 1993]

D.1 Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren (DIRK)

Wie bereits in Abschnitt 5.2.1 angemerkt, schließen die diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) einen guten Kompromiss zwischen Stabilitätsanforderungen und numerischen Aufwand. Die Effizienz wird dabei weiter gesteigert durch den Einsatz eingebetteter Verfahren mit dem Ziel einer adaptiven Schrittweitensteuerung, siehe Abschnitt 5.2.5. Die in der vorliegenden Arbeit verwendeten eingebetteten steif-genauen

DIRK-Verfahren¹ besitzen ein allgemeines Parameterschema der Gestalt

$$\begin{array}{c|cccc}
 c_1 & a_{11} & 0 & \dots & 0 \\
 c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\
 \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\
 c_s & b_1 & b_2 & \dots & b_s \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_s \\
 & \hat{b}_1 & \hat{b}_2 & \dots & \hat{b}_s
 \end{array}
 \Leftrightarrow
 \begin{array}{c|c}
 \mathbf{c} & \mathbf{A} \\
 \hline
 & \mathbf{b}^T \\
 & \hat{\mathbf{b}}^T
 \end{array}
 \quad (\text{D.1})$$

und werden in Tab. D.2 unter Angabe von s , p und der Konsistenzordnung des eingebetteten Verfahren niedriger Ordnung $\hat{p} = p - 1$ konkretisiert.

Lediglich für das klassische implizite Euler-Verfahren (BE) kann keine Einbettung, d. h. der Vektor $\hat{\mathbf{b}}$, angegeben werden. Das kombinierte Verfahren bestehend aus Trapezregel und dem eingebetteten impliziten Euler-Verfahren (Trapez/CAA), siehe Tab. D.2(b), besitzt nur formal $s = 3$ Stufen. Bezugnehmend auf Abschnitt 5.2.1 führt die Parameterwahl der Trapezregel $c_1 = 0$ und $a_{11} = 0$ auf $\mathbf{Y}_{n1} = \mathbf{y}_n$ und $\dot{\mathbf{Y}}_{n1} = \dot{\mathbf{y}}_n$, sodass die Berechnungen der ersten Stufe entfallen. Damit ist für das kombinierte Verfahren lediglich noch eine Sequenz von zwei nichtlinearen Gleichungssystemen in einem Zeitschritt zu durchlaufen. Der dritte in Tab. D.2 spezifizierte Integrator nach Ellsiepen [1999] ist eine zeitadaptive Erweiterung des von Alexander [1977] entworfenen SDIRK-Verfahrens zweiter Ordnung. Ähnlich verhält es sich bei Aneinanderreihung der Namen Alexander/Cash, bei der die Methode von Cash [1979] einer zeitadaptiven Erweiterung des SDIRK-Verfahrens zweiter Ordnung von Alexander [1977] entspricht. Sie werden daher im Folgenden durch Alex2/Ell und Alex3/Cash abgekürzt.

Im Rahmen der in dieser Arbeit durchgeführten Konvergenz- und Aufwandsstudien sollte verständlicherweise die Einbettung für sämtliche Integratoren ausgeschaltet werden, also der Vektor $\hat{\mathbf{b}}$ aus den Butcher-Tableaus ausgeblendet werden. Einzige Ausnahme bildet die Trapezregel (Trapez/CAA) dessen Butcher-Array ohne den eingebetteten impliziten Euler die reduzierte Gestalt

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & 0 & \\
 1 & 0.5 & 0.5 \\
 \hline
 & 0.5 & 0.5
 \end{array}
 \quad (\text{D.2})$$

annimmt und somit durch $p = 2$ charakterisiert wird.²

Auch hier entfällt aufgrund von $c_1 = 0$ und $a_{11} = 0$ die erste Stufenberechnung, sodass nur ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen ist. Für weitere Details zu den in Tab. D.2 aufgelisteten DIRK-Verfahren sei auf [Ellsiepen und Hartmann, 2001; Hartmann, 2003] verwiesen.

¹Alle DIRK-Integratoren aus Tab. D.2 können in eine noch kleinere Subkategorie der SDIRK-Methoden einsortiert werden. SDIRK-Verfahren kennzeichnen einfach diagonal-implizite Runge-Kutta Methoden mit identischen Diagonaleinträgen in der Wichtungsmatrix \mathbf{A} , d. h. $a_{ii} = \gamma$, $i = 1, \dots, s$.

²Sowohl die eingebettete als auch die nicht eingebettete Version der Trapezregel werden durch die Abkürzung Trapez/CAA gekennzeichnet. Die Bedeutung des Akronyms erschließt sich dann aus dem Verwendungszweck bzw. aus dem inhaltlichen Kontext.

Tabelle D.2: Butcher-Tableaus für das implizite Euler-Verfahren und weiterer angewendeter steif-genauer DIRK-Verfahren höherer Ordnung mit zugehöriger Einbettung

(a) Impl. Euler-Verfahren (**BE**): $s = 1, p = 1$

1	1
1	1

(b) Komb. aus Trapezregel (**Trapez/CAA**) und impl. Euler(**BE**): $s = 3, p = 2, \hat{p} = 1$

0	0		
1	0	1	
1	0.5	0	0.5
	0.5	0	0.5
	0	1	0

(c) Alexander/Ellsiepen (**Alex2/Ell**): $s = 2, p = 2, \hat{p} = 1$

α	α	
1	$1 - \alpha$	α
	$1 - \alpha$	α
	$1 - \hat{\alpha}$	$\hat{\alpha}$

$$\alpha = 1 - \frac{1}{2}\sqrt{2}, \quad \hat{\alpha} = 2 - \frac{5}{4}\sqrt{2}$$

(d) Alexander/Cash (**Alex3/Cash**): $s = 3, p = 3, \hat{p} = 2$

γ	γ			$\gamma =$	0.435 866 521 508 458 0
δ	$\tau - \gamma$	γ		$\tau - \gamma =$	0.282 066 739 245 770 5
1	α	β	γ	$\alpha =$	1.208 496 649 176 010 1
	α	β	γ	$\beta =$	-0.644 363 170 684 469 1
	$\hat{\alpha}$	$\hat{\beta}$	0	$\delta =$	0.717 933 260 754 229 5
				$\hat{\alpha} =$	0.772 630 127 667 551 1
				$\hat{\beta} =$	0.227 369 872 332 448 9

D.2 Diagonal-implizite Runge-Kutta-Nyström Verfahren (DIRKN)

Bezugnehmend auf das in Tab. 5.1 aufgeführte semidiskrete Differentialgleichungssystem ist es zweckmäßig, im Rahmen einer speicherplatzsparenden FEM-Programmimplementierung die in Abschnitt 5.2.1 dargestellte Verfahrensvorschrift eines DIRK-Integrators in eine gleichwertiges Schema für ein indirektes DIRKN-Verfahren, siehe Abschnitt 5.2.2 zu überführen. Mit der Transformation (5.128) gelingt es für alle in Tab. D.2 aufgelisteten DIRK-Methoden das zugehörige Butcher-Tableau eines indirekten DIRKN-Verfahren zu konstruieren.

Allgemeine Nyström Methoden (direkte Runge-Kutta-Nyström Verfahren) ohne eine Wichtungsmatrix \mathbf{A} sind in der vorliegenden Arbeit nur von untergeordnetem Interesse, da diesen Zeitintegratoren die Behandlung von Differentialgleichungsanteilen erster Ordnung, wie beispielsweise den Entwicklungsgleichungen für die inneren Variablen oder der semidiskreten Wärmeleitungsgleichung, verwehrt bleibt. Von Sharp et al. [1990] wurden zwei direkte einfach diagonal-implizite Runge-Kutta-Nyström Verfahren (SDIRKN) veröffentlicht, deren Butcher-Tableaus in Tab. D.3 zusammengestellt sind.

Tabelle D.3: Butcher-Tableaus für SDIRKN-Verfahren nach Sharp et al. [1990]

(a) **Sharp3**: $s = 2, p = 3$

$\frac{17}{14}$	$\frac{289}{392}$	
$\frac{23}{60}$	$-\frac{234179}{352800}$	$\frac{289}{392}$
	$-\frac{21}{698}$	$\frac{185}{349}$
	$\frac{49}{349}$	$\frac{300}{349}$

(b) **Sharp4**: $s = 3, p = 4$

$\frac{3}{5}$	$\frac{9}{50}$		
$\frac{9}{10}$	$\frac{9}{40}$	$\frac{9}{50}$	
$\frac{6}{37}$	$\frac{234657}{1266325}$	$-\frac{891891}{2532650}$	$\frac{9}{50}$
	$\frac{115}{729}$	$\frac{55}{2457}$	$\frac{42439}{132678}$
	$\frac{575}{1458}$	$\frac{550}{2457}$	$\frac{50653}{132678}$

D.3 Newmark-Verfahren

Die Semidiskretisierung zeitabhängiger elastischer Probleme mit der in Abschnitt 5.1 vorgestellten Finite-Elemente-Methode führt auf das diskrete Anfangs-Randwertproblem

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}, t) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t), \quad \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad \dot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{v}_0. \quad (\text{D.3})$$

Der wohl in der Mechanik am weitesten verbreitete Zeitintegrationsalgorithmus zur Behandlung eines solchen Differentialgleichungssystems zweiter Ordnung aus dem Bereich der Elastodynamik geht auf Newmark [1959] zurück. Detaillierte Analysen der Newmark-Familie in Bezug auf Anwendungen in der Strukturdynamik sind z. B. [Bathe und Wilson, 1972; Goudreau und Taylor, 1973; Hughes, 1977; Hilber et al., 1977; Hughes, 1983; Hughes, 2000] zu entnehmen.

Die Motivation der Newmark-Verfahren³ erfolgt aus einem linearen Beschleunigungsansatz innerhalb des Zeitintervalls $t \in [t_n, t_{n+1}]$ heraus, dessen Parametrisierung durch $\beta \in [0, 1/2]$ und $\gamma \in [0, 1]$ sowie Integration über $[t_n, t_{n+1}]$ in Kombination mit dem System (D.3) in der folgenden Verfahrensvorschrift

$$\mathbf{G}_u(\mathbf{a}_{n+1}) = \mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1} + \mathbf{g}_u(\mathbf{u}_{n+1}(\mathbf{a}_{n+1}), t_{n+1}) + \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1}) = \mathbf{0}, \quad (\text{D.4})$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \mathbf{v}_n + \frac{\Delta t_n^2}{2} \{(1 - 2\beta)\mathbf{a}_n + 2\beta\mathbf{a}_{n+1}\}, \quad (\text{D.5})$$

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t_n \{(1 - \gamma)\mathbf{a}_n + \gamma\mathbf{a}_{n+1}\} \quad (\text{D.6})$$

mündet.⁴ Wie zahlreiche Autoren zeigen, siehe exemplarisch [Hughes, 2000], besitzen die Newmark-Verfahren lediglich für die algorithmische Parameterwahl $\gamma = 1/2$ die Konsistenzordnung $p = 2$. Eine Veränderung dieses Parameters führt zum Verlust der Genauigkeitsordnung, ermöglicht allerdings eine numerische Dämpfung der höherfrequenten Schwingungsmoden und damit praktikablere Schrittweiten Δt_n . Angewendet auf linear-elastische Problemstellungen sind die Newmark-Verfahren für $2\beta \geq \gamma \geq 1/2$ unbedingt stabil.⁵ Weiterhin ist unter Betrachtung von Gl. (D.5) ersichtlich, dass es sich lediglich für $\beta = 0$ um einen expliziten Zeitintegrator⁶ handelt. Andernfalls ist

³In zahlreichen wissenschaftlichen Diskussionen werden die Newmark-Verfahren auch als Newmark- β Methoden (N- β) bezeichnet.

⁴Neben der Beschleunigungsformulierung (D.4) wird durch Umstellen von Gl. (D.5) häufig auch eine Aufstellung des nichtlinearen Gleichungssystems in Abhängigkeit der Verschiebungen \mathbf{u}_{n+1} gewählt. Darüber hinaus ist es möglich, die Newmark-Verfahren als Mehrschrittvariante anzugeben, die weiter zurückliegende Daten aus dem Zeitschritt t_{n-1} nutzt.

⁵Viele klassische Zeitintegrationsalgorithmen, hierunter auch die Newmark- β Methoden, verlieren bei geometrisch nichtlinearem Strukturverhalten die Eigenschaft der unbedingten Stabilität. Ein wichtiger Indikator zur Beurteilung dieses Sachverhalts ist das Kriterium der energetischen Stabilität, siehe [Belytschko und Schoeberle, 1975; Hughes, 1976; Hughes, 1977]

⁶Im Fall einer konsistenten Massenmatrix \mathbf{M} muss das aus Gl. (D.4) hervorgehende lineare Gleichungssystem $\mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1} = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}_n + \Delta t_n \mathbf{v}_n + \Delta t_n^2/2 \mathbf{a}_n, t_{n+1}) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$ einmal pro Zeitschritt nach den unbekannten Beschleunigungen \mathbf{a}_{n+1} aufgelöst werden. Da es sich allerdings bei der Massenmatrix um eine konstante Größe handelt, ist es zweckmäßig, die Faktorisierung der Matrix einmalig in einem Initialisierungsschritt abzuspeichern und nur eine Vorwärts- und Rückwärtssubstitution zur Lösung des linearen Gleichungssystems durchzuführen. Weist die Massenmatrix eine Diagonalstruktur (konzentrierte Massenmatrix) auf, sind lediglich Funktionsauswertungen zur Bestimmung von \mathbf{a}_{n+1} erforderlich.

das Verfahren implizit und erfordert innerhalb jedes Zeitschritts $t \in [t_n, t_{n+1}]$ die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems (D.4). Tab. D.4 zeigt eine Übersicht mit den

Tabelle D.4: Verbreitete Newmark-Verfahren

Verfahren	γ	β	Ordnung p	Eigenschaften ^a
Konstante Beschleunigungs- methode (Trapez/CAA)	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	2	implizit, unbedingt stabil, al- gorithmisch ungedämpft
Lineare Beschleunigungs- methode	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$	2	implizit, bedingt stabil, algo- rithmisch gedämpft
Fox-Goodwin-Verfahren	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{12}$	2	implizit, bedingt stabil, algo- rithmisch gedämpft
Zentrales Differenzenverfahren	$\frac{1}{2}$	0	2	explizit, bedingt stabil, algo- rithmisch gedämpft

^aSiehe Fußnote 5

verbreitesten Newmark-Verfahren und deren Parameterspezifikation.

Im Gegensatz zu den meisten vorgestellten DIRK-Methoden⁷ sind die Newmark-Verfahren nicht selbststartend. Die Beschleunigungen zum Startzeitpunkt $\ddot{\mathbf{u}}(t_0) = \mathbf{a}_0 \in \mathbb{R}^{n_{uu}}$ resultieren dann unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung \mathbf{u}_0 aus der Erfüllung der semidiskreten Bewegungsgleichung (D.3) zum Zeitpunkt t_0 , d. h. aus der Lösung des linearen Gleichungssystems $\mathbf{M}\mathbf{a}_0 = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}_0, t_0) - \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(t_0)$.

Wie zuvor in Abschnitt 5.2.2 angemerkt, sind natürlicherweise die Newmark-Verfahren in der Klasse der diagonal-impliziten Runge-Kutta-Nyström Methoden in Gestalt des zweistufigen Butcher-Tableaus 5.5c eingebettet. Für den Nachweis wird beziehungsweise auf das raumdiskretisierte ODE-System (D.3) eine Beschleunigungsformulierung des entsprechenden nichtlinearen Gleichungssystems herangezogen. Unter Berücksichtigung der Definitionen aus Abschnitt 5.2.2 gelten für die erste Stufe $i = 1$

$$T_{n1} = t_n, \quad (\text{D.7})$$

$$\mathbf{U}_{n1} = \mathbf{u}_n, \quad (\text{D.8})$$

$$\mathbf{G}_u(\mathbf{A}_{n1}) = \mathbf{M}\mathbf{A}_{n1} + \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n1}, T_{n1}) + \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(T_{n1}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{A}_{n1} = \mathbf{a}_n \quad (\text{D.9})$$

und für $i = 2$

$$T_{n2} = t_{n+1}, \quad (\text{D.10})$$

$$\mathbf{U}_{n2} = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \mathbf{v}_n + \Delta t_n^2 \left\{ \left(\frac{1}{2} - \beta \right) \mathbf{A}_{n1} + \beta \mathbf{A}_{n2} \right\}, \quad (\text{D.11})$$

$$\mathbf{G}_u(\mathbf{A}_{n2}) = \mathbf{M}\mathbf{A}_{n2} + \mathbf{g}_u(\mathbf{U}_{n2}(\mathbf{A}_{n2}), T_{n2}) + \overline{\mathbf{M}}\ddot{\mathbf{u}}(T_{n2}) = \mathbf{0}. \quad (\text{D.12})$$

⁷Einzige Ausnahme bildet die Trapezregel(Trapez/CAA), welche in sämtlichen in dieser Arbeit aufgeführten Verfahrensklassen enthalten ist.

Die unbekannten Strukturvektoren \mathbf{u}_{n+1} und \mathbf{v}_{n+1} zum nächsten Zeitpunkt t_{n+1} bestimmen sich gemäß

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \mathbf{v}_n + \Delta t_n^2 \left\{ \left(\frac{1}{2} - \beta \right) \mathbf{A}_{n1} + \beta \mathbf{A}_{n2} \right\} \quad (\text{D.13})$$

und

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t_n \{ (1 - \gamma) \mathbf{A}_{n1} + \gamma \mathbf{A}_{n2} \}. \quad (\text{D.14})$$

Die formalen Ersetzungen $\mathbf{A}_{n1} = \mathbf{a}_n$, $\mathbf{A}_{n2} = \mathbf{a}_{n+1}$ und $T_{n2} = t_{n+1}$ sowie die infolge der steifgenauen Eigenschaft des DIRKN-Verfahrens existierende Äquivalenzaussage $\mathbf{U}_{n2} = \mathbf{u}_{n+1}$ substituieren Gl. (D.10) bis (D.12) durch

$$\mathbf{G}_u(\mathbf{a}_{n+1}) = \mathbf{M} \mathbf{a}_{n+1} + \mathbf{g}_u(\mathbf{u}_{n+1}(\mathbf{a}_{n+1}), t_{n+1}) + \overline{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1}) = \mathbf{0}, \quad (\text{D.15})$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t_n \mathbf{v}_n + \Delta t_n^2 \left\{ \left(\frac{1}{2} - \beta \right) \mathbf{a}_n + \beta \mathbf{a}_{n+1} \right\}, \quad (\text{D.16})$$

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t_n \{ (1 - \gamma) \mathbf{a}_n + \gamma \mathbf{a}_{n+1} \}. \quad (\text{D.17})$$

Aus der Parameterwahl $c_1 = 0$ und $\bar{a}_{11} = 0$ folgen die Beziehungen (D.7) und (D.8), sodass in Kombination mit Gl. (D.15) die effektive Strukturgleichung

$$\mathbf{M} \mathbf{a}_n = -\mathbf{g}_u(\mathbf{u}_n, t_n) - \overline{\mathbf{M}} \ddot{\mathbf{u}}(t_n) \quad (\text{D.18})$$

zu jedem Zeitpunkt t_n , $n = 0, 1, \dots, N$, erfüllt ist und sich die zu Beginn des Nachweises postulierte Nomenklatur $\mathbf{A}_{n1} = \mathbf{a}_n$ als korrekt erweist. Die Identität des Gleichungsblocks (D.15) bis (D.17) mit der Verfahrensvorschrift (D.4) bis (D.6) der Newmark-Familie komplettiert den zu erbringenden Beweis.

D.4 Projektionsmethode

Die in diesem Unterabschnitt vorgestellte Methodik stellt eine Möglichkeit dar, die mit der analytischen Lösung $\mathbf{y}(t)$ von Gl. (5.106) verknüpften Invarianten oder sogenannten erste Integrale auch für die zeitdiskretisierte Lösung zu erhalten. Für einen umfassenden Überblick zu dieser Thematik sei auf die Arbeiten von Shampine [1986], Gear [1986], Shampine [1999] und Hairer et al. [2002] verwiesen.

Die bekannte numerische Lösung $\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}$ des angewendeten Einschrittverfahrens wird nach jedem Zeitschritt Δt_n durch die Lösung \mathbf{y}_{n+1} des Optimierungsproblems unter Gleichheitsnebenbedingungen

$$\|\mathbf{y}_{n+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1}\| \rightarrow \min \quad \text{unterliegt} \quad C_E(\mathbf{y}_{n+1}) = 0 \quad (\text{D.19})$$

ersetzt. Hierbei setzen sich die dimensionslosen Vektoren

$$\tilde{\mathbf{y}}_{n+1} := \left\{ \begin{array}{c} \frac{\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}}{\hat{u}_{\text{dim}}} \\ \frac{\tilde{\mathbf{v}}_{n+1}}{\hat{v}_{\text{dim}}} \end{array} \right\} \quad \text{und} \quad \mathbf{y}_{n+1} := \left\{ \begin{array}{c} \frac{\mathbf{u}_{n+1}}{\hat{u}_{\text{dim}}} \\ \frac{\mathbf{v}_{n+1}}{\hat{v}_{\text{dim}}} \end{array} \right\} \quad (\text{D.20})$$

aus den Verschiebungen $\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}$, \mathbf{u}_{n+1} und Geschwindigkeiten $\tilde{\mathbf{v}}_{n+1}$, \mathbf{v}_{n+1} zum Zeitpunkt t_{n+1} zusammen. Die Parameter \hat{u}_{dim} und \hat{v}_{dim} sind für eine Entdimensionierung der Verschiebungen und Geschwindigkeiten erforderlich und müssen problemabhängig gewählt werden. Die Anwendung der Lagrange-Multiplikator-Methode zur Lösung des Optimierungsproblems (D.20) unter Nebenbedingungen impliziert das Lagrange-Funktional

$$\mathcal{L}_p(\mathbf{y}_{n+1}, \lambda_p) := \frac{1}{2} \|\mathbf{y}_{n+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1}\|^2 - \lambda_p C_E(\mathbf{y}_{n+1}). \quad (\text{D.21})$$

Die notwendige Forderung der Stationarität der Ableitung des Funktionals

$$\underbrace{D_{\mathbf{y}_{n+1}} \mathcal{L}_p(\mathbf{y}_{n+1}, \lambda_p) [\delta \mathbf{y}_{n+1}]}_{\Delta \mathcal{L}_{p,I}=0} + \underbrace{D_{\lambda_p} \mathcal{L}_p(\mathbf{y}_{n+1}, \lambda_p) [\delta \lambda_p]}_{\Delta \mathcal{L}_{p,II}=0} = 0, \quad (\text{D.22})$$

mit

$$\Delta \mathcal{L}_{p,I}(\mathbf{y}_{n+1}, \lambda_p) := \delta \mathbf{y}_{n+1}^T \left\{ \mathbf{y}_{n+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1} - \lambda_p \left\{ \frac{dC_E}{d\mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_{n+1}} \right\}^T \right\}, \quad (\text{D.23})$$

$$\Delta \mathcal{L}_{p,II}(\mathbf{y}_{n+1}, \lambda_p) := \delta \lambda_p C_E(\mathbf{y}_{n+1}), \quad (\text{D.24})$$

führt auf ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem

$$\mathbf{y}_{n+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1} - \lambda_p \left\{ \frac{dC_E}{d\mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_{n+1}} \right\}^T = \mathbf{0} \quad (\text{D.25})$$

$$C_E(\mathbf{y}_{n+1}) = 0 \quad (\text{D.26})$$

in Abhängigkeit von \mathbf{y}_{n+1} und λ_p . Die Approximation der Ableitung

$$\frac{dC_E}{d\mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_{n+1}} \approx \frac{dC_E}{d\mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{y}=\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}} \quad (\text{D.27})$$

entkoppelt das nichtlineare Gleichungssystem, sodass schließlich nur noch eine skalare quadratische Gleichung für die energetische Zwangsbedingung

$$\begin{aligned} C_E(\mathbf{y}_{n+1}) &= C_E \left(\tilde{\mathbf{y}}_{n+1} + \lambda_p \left\{ \frac{dC_E}{d\mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{y}=\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}} \right\}^T \right) \\ &=: \hat{C}_E(\lambda_p) = 0 \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

in Abhängigkeit des Lagrange-Multiplikators λ_p nach jedem Zeitintegrationsschritt gelöst werden muss. Unter der Annahme, dass die Lösung von Gl. (D.28) zwei reellwertige Nullstellen λ_{p1} und λ_{p2} besitzt, wird zur Minimierung der Distanz $\|\mathbf{y}_{n+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1}\|$, der betragsmäßig kleinste Lagrange-Multiplikator, d. h. $\lambda_p = \min(|\lambda_{p1}|, |\lambda_{p2}|)$, gewählt. Aus der bereits zuvor ausgenutzten linearen Beziehung folgt

$$\mathbf{y}_{n+1} = \tilde{\mathbf{y}}_{n+1} + \lambda_p \left\{ \frac{dC_E}{d\mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{y}=\tilde{\mathbf{y}}_{n+1}} \right\}^T. \quad (\text{D.29})$$

Abschließend sei noch einmal hervorgehoben, dass die durch die Approximation (D.28) ermöglichte Vereinfachung zu einer signifikanten Senkung des Rechenaufwands führt.

E Analytische Lösungen

E.1 Analytische Lösung der Wellengleichung

In dem nachfolgenden Abschnitt soll eine analytische Lösung des allgemeinen eindimensionalen Anfangs-Randwertproblems (ARWP) aus Abschnitt 6.1.3, bestehend aus den Gl. (6.19) bis (6.21), angegeben werden. Der hierbei beschrittene Lösungsweg orientiert sich an den Arbeiten von Meyberg und Vachenauer [2001, S. 358–404] und Rothe et al. [2015b]. Zur Vereinfachung der Schreibweise wird auf die konsistente Mitführung von Einheiten dimensionsbehafteter Größen verzichtet.

Infolge der inhomogenen Neumann-Randbedingung (6.21)₂ am rechten Stabende¹ setzt sich die Verschiebungslösung $u(x, t)$ aus der Superposition von zwei Anteilen zusammen:

$$u(x, t) = \tilde{u}(x, t) + \bar{u}(x, t) \quad (\text{E.1})$$

Für den zweiten Lösungsanteil $\bar{u}(x, t)$, der den inhomogenen Randbedingungen (6.21) genügt, wird der Ansatz

$$\bar{u}(x, t) = g(t) + \frac{x}{L}(Lh(t) - g(t)) \quad (\text{E.2})$$

gewählt. Die Vereinfachung $g(t) = 0$, siehe Gl. (6.21)₁, führt auf den Ausdruck

$$\bar{u}(x, t) = xh(t). \quad (\text{E.3})$$

Wird der additive Ansatz (E.1) in das Anfangs-Randwertproblem (6.19) bis (6.21) unter Beachtung des präzierten Lösungssummanden $\bar{u}(x, t)$ eingesetzt, resultiert zur Bestimmung von $\tilde{u}(x, t)$ das transformierte ARWP mit homogenen Randbedingungen

$$\frac{\partial^2 \tilde{u}(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \tilde{u}(x, t)}{\partial x^2} + H(x, t), \quad (\text{E.4})$$

$$H(x, t) := c^2 \frac{\partial^2 \bar{u}(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{u}(x, t)}{\partial t^2} = -x\ddot{h}(t) = x\hat{\varepsilon}\Omega^2 \sin(\Omega t),$$

$$\tilde{u}(x, 0) := \tilde{u}_0(x) = u_0(x) - \bar{u}(x, 0) = -xh(0) = 0, \quad (\text{E.5})$$

$$\dot{\tilde{u}}(x, 0) := \tilde{v}_0(x) = v_0(x) - \dot{\bar{u}}(x, 0) = -x\dot{h}(0) = -x\hat{\varepsilon}\Omega,$$

$$\tilde{u}(0, t) = 0, \quad \frac{\partial \tilde{u}(L, t)}{\partial x} = \frac{\partial u(L, t)}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}(L, t)}{\partial x} = 0. \quad (\text{E.6})$$

Zur Lösung der inhomogenen partiellen Differentialgleichung (PDE) mit homogenen Randbedingungen, siehe Gl. (E.4), ist $\tilde{u}(x, t)$ ein weiteres Mal additiv in

$$\tilde{u}(x, t) = \hat{u}(x, t) + \check{u}(x, t) \quad (\text{E.7})$$

¹Am rechten Stabende greift eine Einzelkraft $F(t)$ an, siehe Abb. 6.9.

aufzuspalten. Innerhalb dieser Zerlegung kennzeichnet $\hat{u}(x, t)$ die Lösung der homogenen PDE, d. h. $H(x, t) = 0$,² und $\tilde{u}(x, t)$ den Lösungsanteil der inhomogenen PDE mit homogenen Nebenbedingungen.³ Mit Hilfe des Separationsansatzes $\hat{u}(x, t) = X(x)T(t)$ gelingt es, das Eigenwertproblem

$$X''(x) + \frac{\omega^2}{c^2}X(x) = 0, \quad \ddot{T}(t) + \omega^2 T(t) = 0, \quad (\text{E.8})$$

mit einer der jeweiligen Schwingungsform des Stabs zugeordneten Eigenkreisfrequenz ω , $\omega > 0$, zu formulieren.⁴ In Kombination mit der Definition der sogenannten Wellenzahl $k = \omega/c$ ergeben sich die Eigenlösungen

$$X(x) = C \cos(kx) + D \sin(kx). \quad (\text{E.9})$$

Die notwendige Einhaltung der homogenen Randbedingungen (E.6) durch Gl. (E.9) liefert die Zusammenhänge:

$$\hat{u}(0, t) = 0 \rightarrow X(0) = 0 \rightarrow C = 0, \quad (\text{E.10})$$

$$\frac{\partial \hat{u}(L, t)}{\partial x} = 0 \rightarrow X'(L) = 0 \rightarrow D \cos(kL) = 0 \quad (\text{E.11})$$

Unter Gewährleistung der Bedingung (E.11) sowie Ausschluss der trivialen Lösung $X(x) \neq 0$ folgen die Eigenwerte

$$k_n = \frac{\pi}{2L}(2n - 1) \quad (\text{E.12})$$

mit den Eigenlösungen

$$X_n(x) = D_n \sin(k_n x), \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (\text{E.13})$$

Das diskontinuierliche Eigenwertspektrum des Stabs impliziert demnach eine Lösung für $\hat{u}(x, t)$ in Gestalt einer unendlichen Reihe

$$\hat{u}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \hat{u}_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} X_n(x)T_n(t). \quad (\text{E.14})$$

Zu jedem Eigenwert bzw. Wellenzahl $k_n = \omega_n/c$, $n \in \mathbb{Z}$, wird nun die allgemeine Lösung von $\ddot{T}(t) + \omega_n^2 T(t) = 0$, siehe Gl. (E.8)₂, in der Form

$$T_n(t) = \tilde{A}_n \cos(\omega_n t) + \tilde{B}_n \sin(\omega_n t) \quad (\text{E.15})$$

ermittelt. Damit führt der Produktansatz der n -ten Eigenschwingung, mit der Eigenkreisfrequenz

$$\omega_n = ck_n = \frac{c\pi}{2L}(2n - 1), \quad (\text{E.16})$$

²Das zu lösende ARWP hat dann die Gestalt: $\partial^2 \hat{u}(x, t)/\partial t^2 = c^2 \partial^2 \hat{u}(x, t)/\partial x^2$, $\hat{u}(x, 0) = \tilde{u}_0(x)$, $\dot{\hat{u}}(x, 0) = \tilde{v}_0(x)$, $\hat{u}(0, t) = 0$, $\partial \hat{u}(L, t)/\partial x = 0$

³Homogene Nebenbedingungen bezeichnen hier homogene Rand- und Anfangsbedingungen.

⁴In Gl. (E.8) kennzeichnet $X''(x) = d^2 X(x)/dx^2$ die Ableitung bezüglich der Stabkoordinate x .

auf

$$\begin{aligned}
 \hat{u}_n(x, t) &= X_n(x)T_n(t) = D_n \sin(k_n x) (\tilde{A}_n \cos(\omega_n t) + \tilde{B}_n \sin(\omega_n t)) \\
 &= \sin(k_n x) \left(\overbrace{D_n \tilde{A}_n}^{A_n} \cos(\omega_n t) + \overbrace{D_n \tilde{B}_n}^{B_n} \sin(\omega_n t) \right) \\
 &= \sin(k_n x) (A_n \cos(\omega_n t) + B_n \sin(\omega_n t)).
 \end{aligned} \tag{E.17}$$

Die Bestimmung der Parameter A_n und B_n erfolgt aus den Anfangsbedingungen (E.5), welche durch die Überlagerung der Eigenschwingungen, siehe Gl. (E.14), in $0 \leq x \leq L$ erfüllt werden müssen:

$$\begin{aligned}
 \hat{u}(x, 0) &= \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin(k_n x) := \tilde{u}_0(x) = 0, \\
 \dot{\hat{u}}(x, 0) &= \sum_{n=1}^{\infty} B_n \omega_n \sin(k_n x) := \tilde{v}_0(x) = -x \hat{\varepsilon} \Omega
 \end{aligned} \tag{E.18}$$

Kongruent zu der trigonometrischen Struktur der Eigenlösungen (E.13) gelingt es die Funktionen $\tilde{u}_0(x)$ und $\tilde{v}_0(x)$ in einer Fourier-Reihe⁵ zu entwickeln, sodass

$$\tilde{u}_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{u}_{0n} \sin(k_n x) = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{v}_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{v}_{0n} \sin(k_n x) = -x \hat{\varepsilon} \Omega, \tag{E.19}$$

mit den Koeffizienten der Fourier-Sinus-Reihen

$$\begin{aligned}
 \tilde{u}_{0n} &= \frac{2}{L} \int_0^L \tilde{u}_0(\xi) \sin(k_n \xi) d\xi = 0 \quad \text{und} \\
 \tilde{v}_{0n} &= \frac{2}{L} \int_0^L \tilde{v}_0(\xi) \sin(k_n \xi) d\xi = \frac{(-1)^n 2 \hat{\varepsilon} \Omega}{k_n^3 L},
 \end{aligned} \tag{E.20}$$

resultieren. Der Koeffizientenvergleich zwischen Gl. (E.18) und Gl. (E.19) offenbart die Zusammenhänge

$$A_n = \tilde{u}_{0n} = 0 \quad \text{und} \quad B_n = \frac{\tilde{v}_{0n}}{\omega_n} = \frac{(-1)^n 2 \hat{\varepsilon} \Omega}{k_n^3 c L}. \tag{E.21}$$

In der finalen Fassung nimmt die Lösung $\tilde{u}(x, t)$ der homogenen PDE mit homogenen Randbedingungen die Gestalt

$$\hat{u}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \hat{u}_n(x, t) = \frac{2 \hat{\varepsilon} \Omega}{c L} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{k_n^3} \sin(\omega_n t) \sin(k_n x) \tag{E.22}$$

an.

⁵Die Modellierung von $\tilde{u}_0(x)$ und $\tilde{v}_0(x)$ im Intervall $0 \leq x \leq L$ als ungerade Funktionen ermöglicht die Fourier-Reihenentwicklung in Gestalt von unendlichen Sinusreihen.

Zur Lösung der inhomogenen PDE (E.4) mit homogenen Nebenbedingungen, d. h. $\ddot{u}(x, 0) = 0$, $\dot{u}(x, 0) = 0$, $\ddot{u}(0, t) = 0$ und $\partial \ddot{u}(L, t) / \partial x = 0$, wird ebenfalls eine Trennung der Variablen in Form der unendlichen Reihe

$$\ddot{u}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \ddot{u}_n(t) \sin(k_n x) \quad (\text{E.23})$$

herangezogen. Der gewählte Separationsansatz (E.23) und die Entwicklung der rechten Seite $H(x, t) = x \hat{\varepsilon} \Omega^2 \sin(\Omega t)$ in eine Fourier-Sinus-Reihe⁶ bezüglich x ,

$$\begin{aligned} H(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} H_n(t) \sin(k_n x) \quad \text{mit} \\ H_n(t) &= \frac{2}{L} \int_0^L H(\xi, t) \sin(k_n \xi) d\xi = \frac{(-1)^{n+1}}{k_n^2} \frac{2 \hat{\varepsilon} \Omega^2}{L} \sin(\Omega t), \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

führen nach Einsetzen in Gl. (E.4) über einen Koeffizientenvergleich auf

$$\begin{aligned} \ddot{u}_n(t) + \omega_n^2 \ddot{u}_n(t) &= H_n(t) \quad \text{mit} \\ \ddot{u}(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \ddot{u}_n(0) \sin(k_n x) &= 0 \quad \rightarrow \quad \ddot{u}_n(0) = 0, \\ \dot{u}(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \dot{u}_n(0) \sin(k_n x) &= 0 \quad \rightarrow \quad \dot{u}_n(0) = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.25})$$

Der Theorie zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen folgend setzt sich $\ddot{u}_n(t)$ aus einem homogenen Anteil $\ddot{u}_{hn}(t)$ und einem partikulären Anteil $\ddot{u}_{pn}(t)$ zusammen:

$$\ddot{u}_n(t) = \ddot{u}_{hn}(t) + \ddot{u}_{pn}(t) \quad (\text{E.26})$$

Die Lösung des in Gl. (E.25) formulierten Anfangswertproblems lautet

$$\ddot{u}_n(t) = \frac{(-1)^{n+1}}{(\omega_n^2 - \Omega^2) k_n^2} \frac{2 \hat{\varepsilon} \Omega^2}{L} \left(\sin(\Omega t) - \frac{\Omega}{\omega_n} \sin(\omega_n t) \right). \quad (\text{E.27})$$

Nach Einsetzen des Ausdrucks (E.27) in die unendliche Serie (E.23) ergibt sich

$$\ddot{u}(x, t) = \frac{2 \hat{\varepsilon} \Omega^2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{(\omega_n^2 - \Omega^2) k_n^2} \left(\sin(\Omega t) - \frac{\Omega}{\omega_n} \sin(\omega_n t) \right) \sin(k_n x). \quad (\text{E.28})$$

Die Superposition der Beziehungen (E.3), (E.22) und (E.28) führt schließlich auf die gesuchte Lösung des allgemeinen Anfangs-Randwertproblems (6.19) bis (6.21):

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \tilde{u}(x, t) + \bar{u}(x, t) = \hat{u}(x, t) + \ddot{u}(x, t) + \bar{u}(x, t) \\ &= \frac{2 \hat{\varepsilon}}{L} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{k_n^2} \left(\frac{\Omega}{\omega_n} \left(\frac{\Omega^2}{\omega_n^2 - \Omega^2} + 1 \right) \sin(\omega_n t) - \frac{\Omega^2}{\omega_n^2 - \Omega^2} \sin(\Omega t) \right) \sin(k_n x) \right) \\ &\quad + x \hat{\varepsilon} \sin(\Omega t) \end{aligned} \quad (\text{E.29})$$

⁶Verständlicherweise müssen die Ansätze (E.23) und (E.24) auch hier entsprechend der zugrunde liegenden trigonometrischen Struktur der Grundlösungen (E.13) gewählt werden.

Abb. 6.14a veranschaulicht die gesamte Feldbeschreibung für $u(x, t)$ innerhalb $0 \leq x \leq L$ und $t_0 \leq t \leq t_e$ als zweidimensionales Weg-Zeit-Verschiebungsdiagramm. Die Strukturantwort der Geschwindigkeit resultiert aus der zeitlichen Ableitung:

$$\dot{u}(x, t) = \frac{2\hat{\varepsilon}}{L} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{k_n^2} \left(\Omega \left(\frac{\Omega^2}{\omega_n^2 - \Omega^2} + 1 \right) \cos(\omega_n t) - \frac{\Omega^3}{\omega_n^2 - \Omega^2} \cos(\Omega t) \right) \sin(k_n x) \right) + x \hat{\varepsilon} \Omega \cos(\Omega t) \quad (\text{E.30})$$

E.2 Analytische Lösung der thermomechanisch gekoppelten Wellengleichung

In dem nachfolgenden Abschnitt soll eine analytische Lösung des eindimensionalen einseitig thermomechanisch gekoppelten Anfangs-Randwertproblems (ARWP), bestehend aus den Gl. (6.36) und (6.38) bis (6.41), angegeben werden. Der Vollständigkeit halber sei das gesamte zu lösende ARWP noch einmal zusammengefasst:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \alpha_{\Theta} \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial x} \right), \quad (\text{E.31})$$

$$\frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial t} = \frac{\kappa}{\varrho c_p} \frac{\partial^2 \Theta(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\tilde{r}_{\Theta}(x, t)}{\varrho c_p}, \quad \frac{\tilde{r}_{\Theta}(x, t)}{\varrho c_p} = \frac{K_{\Theta}}{\varrho c_p} \sin(\pi x/L) t, \quad (\text{E.32})$$

$$u(x, 0) := u_0(x) = 0, \quad \dot{u}(x, 0) := v_0(x) = 0, \quad (\text{E.33})$$

$$\Theta(x, 0) := \hat{\Theta}_0(x) = \Theta_0, \quad (\text{E.34})$$

$$u(0, t) := g_u(t) = 0, \quad u(L, t) := h_u(t) = 0, \quad (\text{E.35})$$

$$\Theta(0, t) := g_{\Theta}(t) = \Theta_0, \quad \Theta(L, t) := h_{\Theta}(t) = \Theta_0 \quad (\text{E.36})$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise wird auf die konsistente Mitführung von Einheiten dimensionsbehafteter Größen verzichtet. Die in diesem Abschnitt veranschaulichte Prozedur zur Lösung von Gl. (E.31) bis (E.36) orientiert sich an den Arbeiten von Meyberg und Vachnauer [2001, S. 358–404] und Rothe et al. [2015b].

Infolge der Entkopplung der Wärmeleitungsgleichung (E.32) von der Wellengleichung (E.31) wird die Evolutionsgleichung für die Temperatur zuerst gelöst. Analog zu Abschnitt 6.1.3 kommt ein Superpositionsansatz der Gestalt

$$\Theta(x, t) = \tilde{\Theta}(x, t) + \bar{\Theta}(x, t) \quad (\text{E.37})$$

zum Einsatz, wobei der zweite Summand

$$\bar{\Theta}(x, t) = \Theta_0 \quad (\text{E.38})$$

den inhomogenen Temperaturrendbedingungen (E.36) genügt. Das hieraus hervorgehende transformierte ARWP mit homogenen Randbedingungen zur Beschreibung der

Temperaturentwicklung im Stabkontinuum lautet

$$\frac{\partial \tilde{\Theta}(x, t)}{\partial t} = \frac{\kappa}{\varrho c_p} \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}(x, t)}{\partial x^2} + H_{\Theta}(x, t), \quad (E.39)$$

$$H_{\Theta}(x, t) = \frac{\kappa}{\varrho c_p} \frac{\partial^2 \tilde{\Theta}(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial \tilde{\Theta}(x, t)}{\partial t} + \frac{\tilde{r}_{\Theta}(x, t)}{\varrho c_p} = \frac{K_{\Theta}}{\varrho c_p} \sin(\pi x/L)t, \quad (E.40)$$

$$\tilde{\Theta}(x, 0) := \tilde{\Theta}_0(x) = \Theta_0 - \bar{\Theta}(x, 0) = 0, \quad \tilde{\Theta}(0, t) = \tilde{\Theta}(L, t) = 0.$$

Basierend auf der Methode von Fourier wird zur Lösung der inhomogenen partiellen Differentialgleichung (PDE) mit homogenen Randbedingungen $\tilde{\Theta}(x, t)$ ein weiteres Mal additiv in

$$\tilde{\Theta}(x, t) = \hat{\Theta}(x, t) + \check{\Theta}(x, t) \quad (E.41)$$

aufgespalten. In Gl. (E.41) kennzeichnet $\hat{\Theta}(x, t)$ die Lösung der homogenen PDE, d. h. $H_{\Theta}(x, t) = 0$, und $\check{\Theta}(x, t)$ den Lösungsanteil der inhomogenen PDE mit homogenen Nebenbedingungen. Unter Verweis auf die in [Meyberg und Vachenauer, 2001] detailliert geschilderte Vorgehensweise ergeben sich die beiden Lösungsanteile zu

$$\hat{\Theta}(x, t) = 0 \quad (E.42)$$

und

$$\check{\Theta}(x, t) = G_{\Theta 1}(t) \sin(k_{\Theta 1} x), \quad \text{mit} \quad (E.43)$$

$$G_{\Theta 1}(t) = \frac{K_{\Theta}}{\varrho c_p} \frac{e^{-a_{\Theta 1} t} + a_{\Theta 1} t - 1}{a_{\Theta 1}^2}, \quad a_{\Theta 1} = \frac{\kappa}{\varrho c_p} k_{\Theta 1}^2, \quad k_{\Theta 1} = \frac{\pi}{L}.$$

Aus der Zerlegung in einfach zu behandelnde Teilprobleme folgt schließlich das mittels Superposition zusammengefügte Temperaturfeld

$$\Theta(x, t) = \tilde{\Theta}(x, t) + \bar{\Theta}(x, t) = \overbrace{\hat{\Theta}(x, t)}^0 + \check{\Theta}(x, t) + \bar{\Theta}(x, t) \quad (E.44)$$

$$= G_{\Theta 1}(t) \sin(k_{\Theta 1} x) + \Theta_0.$$

Durch Einsetzen der partiellen Ableitung

$$\frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial x} = G_{\Theta 1}(t) k_{\Theta 1} \cos(k_{\Theta 1} x) \quad (E.45)$$

in die Wellengleichung (E.31) kann nun im zweiten Schritt das Verschiebungsfeld $u(x, t)$ ermittelt werden. Prinzipiell findet zum Aufstellen der analytischen Verschiebungsantwort eine identische Verfahrensweise wie in Abschnitt 6.1.3 Anwendung. Im Folgenden werden daher nur von dieser Systematik abweichende Herleitungsschritte konkretisiert.

Die infolge der beidseitig fixierten Stabenden, siehe Abb. 6.26, implizierten homogenen Verschiebungsrandbedingungen (E.35) bewirken das Wegfallen des Lösungssummanden $\bar{u}(x, t)$, sodass

$$\bar{u}(x, t) = 0 \quad (E.46)$$

vorliegt. Aufgrund der damit einhergehenden Identität

$$u(x, t) = \tilde{u}(x, t) = \hat{u}(x, t) + \check{u}(x, t) \quad (\text{E.47})$$

stimmt das spezifizierte ARWP (E.31), (E.33) und (E.35) mit dem transformierten Anfangs-Randwertproblem

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{u}(x, t)}{\partial t^2} &= c^2 \frac{\partial^2 \tilde{u}(x, t)}{\partial x^2} + H_u(x, t), \\ H_u(x, t) &:= c^2 \left(\frac{\partial^2 \bar{u}(x, t)}{\partial x^2} - \alpha_\Theta \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial x} \right) - \frac{\partial^2 \bar{u}(x, t)}{\partial t^2} \end{aligned} \quad (\text{E.48})$$

$$\begin{aligned} &= -\alpha_\Theta c^2 G_{\Theta 1}(t) k_{\Theta 1} \cos(k_{\Theta 1} x), \\ \tilde{u}(x, 0) &:= \tilde{u}_0(x) = u_0(x) - \bar{u}(x, 0) = u_0(x) = 0, \\ \dot{\tilde{u}}(x, 0) &:= \tilde{v}_0(x) = v_0(x) - \dot{\bar{u}}(x, 0) = v_0(x) = 0, \end{aligned} \quad (\text{E.49})$$

$$\tilde{u}(0, t) = \tilde{u}(L, t) = 0 \quad (\text{E.50})$$

überein. Weiterhin bedingen die im Vergleich zu Abb. 6.9 modifizierten Randbedingungen die Eigenlösungen

$$X_n(x) = D_n \sin(k_n x), \quad (\text{E.51})$$

mit den Eigenwerten

$$k_n = \frac{\omega_n}{c} = \frac{n\pi}{L} \quad \Leftrightarrow \quad \omega_n = ck_n = \frac{cn\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (\text{E.52})$$

Die gewählten Anfangsbedingungen (E.49) des sich zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ in Ruhe befindenden Stabs sorgen dafür, dass sich die Integrationskonstanten

$$A_n = \frac{2}{L} \int_0^L \tilde{u}_0(\xi) \sin(k_n \xi) d\xi = 0 \quad \text{und} \quad B_n = \frac{2}{\omega_n L} \int_0^L \tilde{v}_0(\xi) \sin(k_n \xi) d\xi = 0 \quad (\text{E.53})$$

für $n = 1, 2, \dots, \infty$ in Gl. (E.17) zu Null ergeben und somit der Lösungsanteil $\hat{u}(x, t)$ verschwindet. Es gilt

$$\hat{u}(x, t) = 0. \quad (\text{E.54})$$

Der einzig verbleibende Lösungsterm $\check{u}(x, t)$, welcher die inhomogene PDE (E.48) mit homogenen Nebenbedingungen, d. h. $\check{u}(x, 0) = 0$, $\dot{\check{u}}(x, 0) = 0$, $\check{u}(0, t) = 0$ und $\check{u}(L, t) = 0$, erfüllt, resultiert aus der Vorschrift

$$\check{u}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \check{u}_n(t) \sin(k_n x). \quad (\text{E.55})$$

Die Entwicklung der rechten Seite $H_u(x, t)$ in einer Fourier-Sinus-Reihe

$$\begin{aligned} H_u(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} H_{un}(t) \sin(k_n x), \quad \text{mit} \\ H_{un}(t) &= \frac{2}{L} \int_0^L H(\xi, t) \sin(k_n \xi) d\xi = -\frac{2\alpha_\Theta c^2 G_{\Theta 1}(t) k_{\Theta 1}}{L} \frac{(1 + (-1)^n) k_n}{k_n^2 - k_{\Theta 1}^2} \end{aligned} \quad (\text{E.56})$$

und Einsetzen der Beziehungen (E.55) und (E.56) in Gl. (E.48) führt auf

$$\begin{aligned}\ddot{u}_n(t) + \omega_n^2 \check{u}_n(t) &= H_{un}(t) \quad \text{mit} \\ \check{u}(x, 0) &= \sum_{n=1}^{\infty} \check{u}_n(0) \sin(k_n x) = 0 \quad \rightarrow \quad \check{u}_n(0) = 0, \\ \dot{u}(x, 0) &= \sum_{n=1}^{\infty} \dot{u}_n(0) \sin(k_n x) = 0 \quad \rightarrow \quad \dot{u}_n(0) = 0.\end{aligned}\tag{E.57}$$

Nach einer etwas umfangreicheren Handrechnung gelingt es, das Resultat des Anfangswertproblems (E.57) durch

$$\begin{aligned}\check{u}_n(t) &= -\frac{2\alpha_{\Theta} c^2 k_{\Theta 1}}{L} \frac{K_{\Theta}}{\varrho c_p} \frac{(1 + (-1)^n) k_n}{k_n^2 - k_{\Theta 1}^2} p_n(t), \\ p_n(t) &= \frac{((a_{\Theta 1}^2 + \omega_n^2)(a_{\Theta 1} t - 1) + a_{\Theta 1}^2 \cos(\omega_n t)) \omega_n - a_{\Theta 1}^3 \sin(\omega_n t) + \omega_n^3 e^{-a_{\Theta 1} t}}{a_{\Theta 1}^2 \omega_n^3 (a_{\Theta 1}^2 + \omega_n^2)}\end{aligned}\tag{E.58}$$

für $n = 2, 3, \dots, \infty$ zu spezifizieren.⁷ Aus der Substitution von Gl. (E.58) in Gl. (E.55) folgt schließlich der Ausdruck

$$\check{u}(x, t) = -\frac{2\alpha_{\Theta} c^2 k_{\Theta 1}}{L} \frac{K_{\Theta}}{\varrho c_p} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(1 + (-1)^n) k_n}{k_n^2 - k_{\Theta 1}^2} p_n(t) \sin(k_n x),\tag{E.59}$$

welcher gleichzeitig aufgrund

$$\begin{aligned}u(x, t) &= \tilde{u}(x, t) + \bar{u}(x, t) = \overbrace{\hat{u}(x, t)}^0 + \check{u}(x, t) + \overbrace{\bar{u}(x, t)}^0 = \check{u}(x, t) \\ &= -\frac{2\alpha_{\Theta} c^2 k_{\Theta 1}}{L} \frac{K_{\Theta}}{\varrho c_p} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(1 + (-1)^n) k_n}{k_n^2 - k_{\Theta 1}^2} p_n(t) \sin(k_n x),\end{aligned}\tag{E.60}$$

die gesuchte Verschiebungslösung des mechanischen Anfangs-Randwertproblems (E.31), (E.33) und (E.35) repräsentiert. Die Strukturantwort der Geschwindigkeit resultiert aus der zeitlichen Ableitung

$$\begin{aligned}\dot{u}(x, t) &= -\frac{2\alpha_{\Theta} c^2 k_{\Theta 1}}{L} \frac{K_{\Theta}}{\varrho c_p} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(1 + (-1)^n) k_n}{k_n^2 - k_{\Theta 1}^2} \dot{p}_n(t) \sin(k_n x), \quad \text{mit} \\ \dot{p}_n(t) &= \frac{a_{\Theta 1}^2 (1 - \cos(\omega_n t)) + \omega_n^2 (1 - e^{-a_{\Theta 1} t}) - a_{\Theta 1} \omega_n \sin(\omega_n t)}{a_{\Theta 1} \omega_n^2 (a_{\Theta 1}^2 + \omega_n^2)}.\end{aligned}\tag{E.61}$$

Zum Hervorheben des Einflusses der Massenträgheit auf das longitudinale Schwingungsverhalten des Stabs sei die mechanische quasistatische Strukturantwort

$$u(x, t) = \frac{\alpha_{\Theta} G_{\Theta 1}(t)}{k_{\Theta 1}} \left(1 - 2\frac{x}{L} - \cos(k_{\Theta 1} x)\right)\tag{E.62}$$

⁷Aus $H_{u1}(t) = 0$ folgt unmittelbar $\check{u}_1(t) = 0$, sodass die Summe von $n = 2, 3, \dots, \infty$ läuft.

als Lösung des Anfangs-Randwertproblems (6.42) bis (6.45) ergänzend angegeben. Da das thermische Teilproblem unverändert bleibt, wird weiterhin das Temperaturfeld durch Gl. (E.44) beschrieben. Unter Berücksichtigung der Beziehung für $\Theta(x, t)$, siehe Gl. (E.44), folgt aus der zweifachen Integration von Gl. (6.42) sowie nach Bestimmung der Integrationskonstanten aus den spezifizierten Randbedingungen das angegebene Resultat (E.62). Für weitere Details zur Herleitung der analytischen Lösung (E.62) sei auf [Rothe et al., 2015b] referiert.

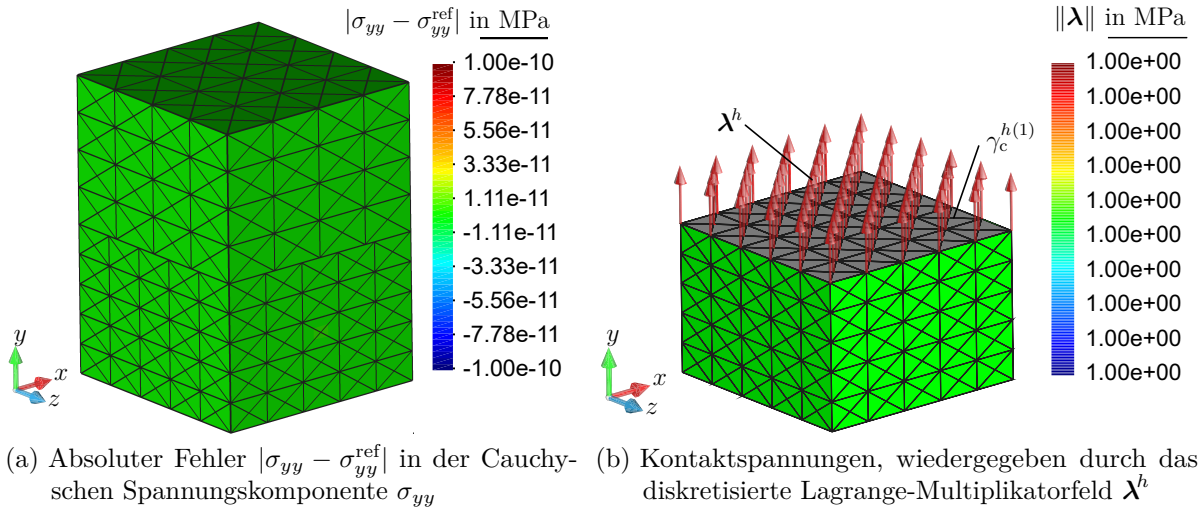


Abbildung F.2: Darstellung der Resultate des dreidimensionalen Kontakt-Patch-Tests für eine Berechnung mit 4-knotigen linearen Tetraeder-Elementen (Tet4)

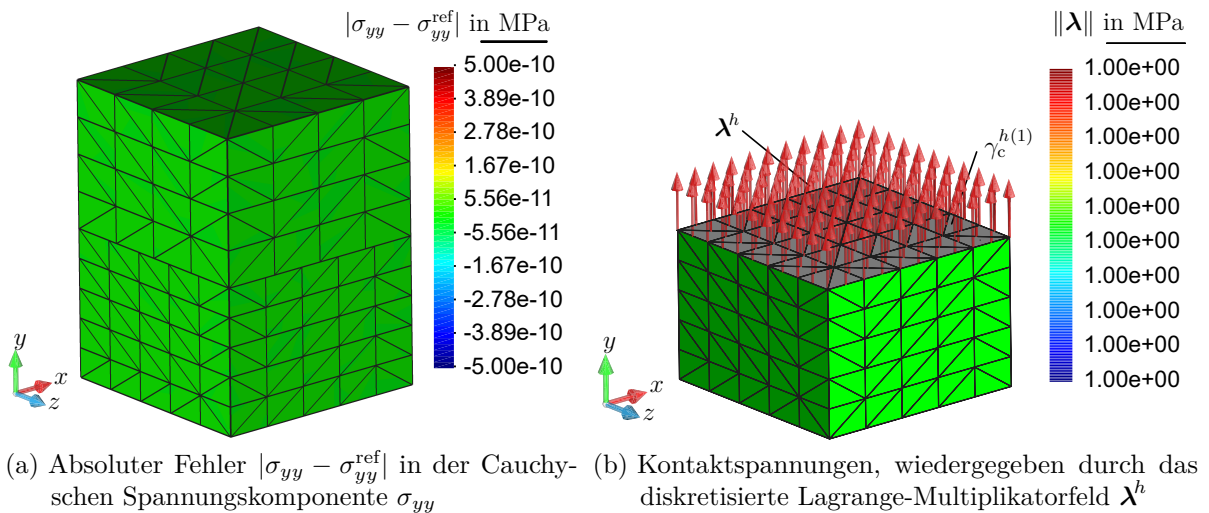


Abbildung F.3: Darstellung der Resultate des dreidimensionalen Kontakt-Patch-Tests für eine Berechnung mit 10-knotigen linearen Tetraeder-Elementen (Tet10)

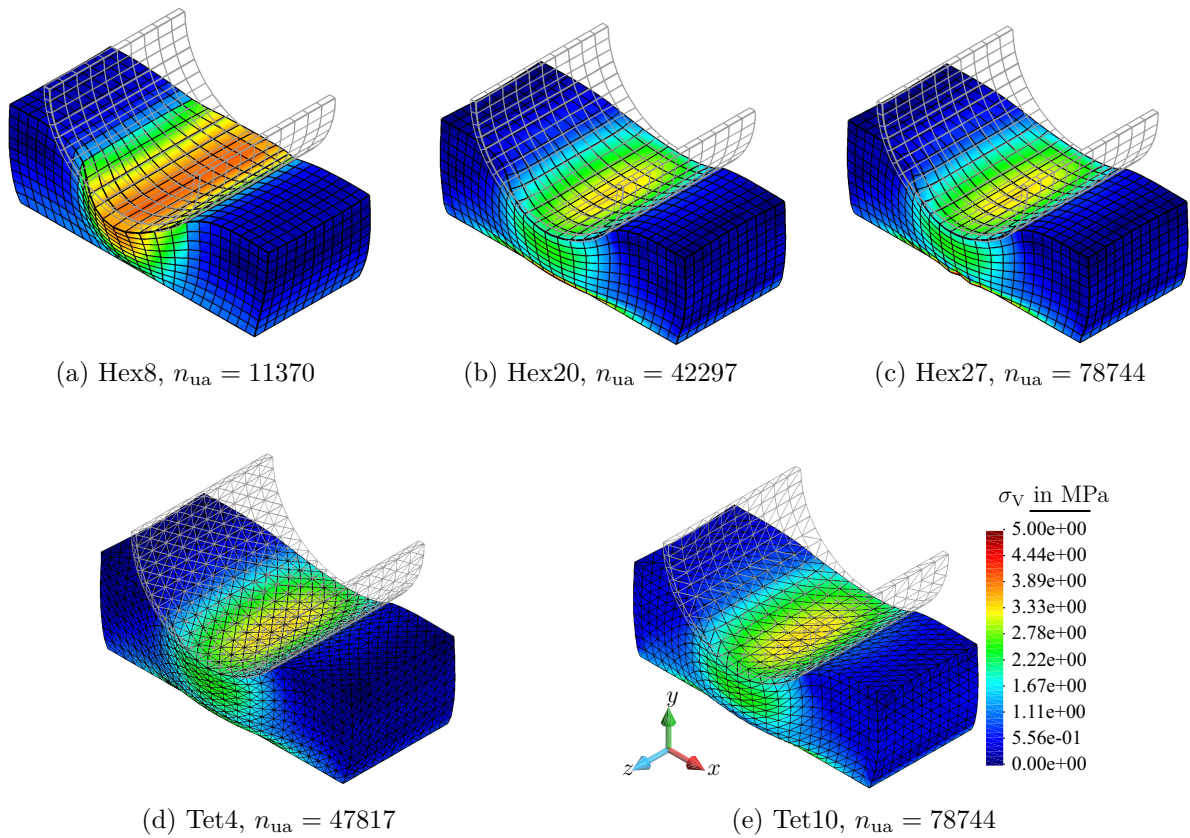


Abbildung F.4: Dreidimensionaler Eindruckversuch, ausgewertet für verschiedene Elementtypen - Darstellung der von Mises Spannungsverteilung zum Zeitpunkt $t_n = 1$ s

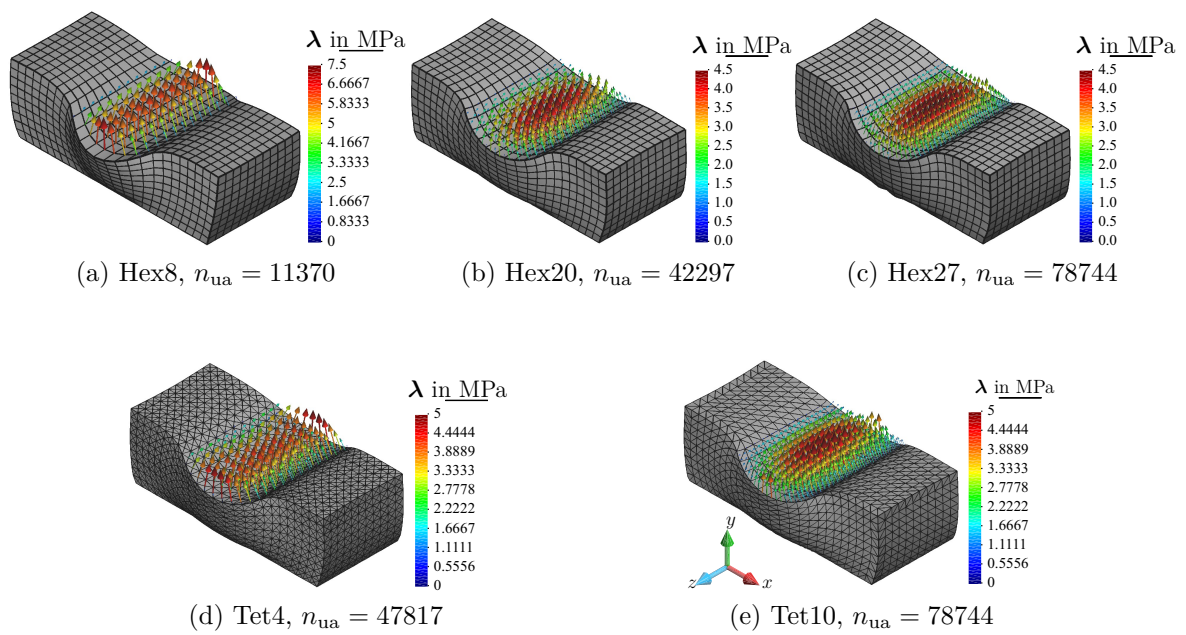


Abbildung F.5: Dreidimensionaler Eindruckversuch, ausgewertet für verschiedene Elementtypen - Darstellung der Lagrange-Multiplikatorverteilung im Interface zum Zeitpunkt $t_n = 1$ s

G Symbolverzeichnis

Akronyme

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
ARWP	Anfangs-Randwertproblem	13
AABB	Achspareller Hüllkörper (axis aligned bounding box)	334
BVH	Hierarchie von Hüllkörpern zur Kontaktdetektion (bounding volume hierarchy)	334
BVT	Datenstrukturtopologie zum Abspeichern von (bounding volume tree)	334
CAD	Rechnergestütztes Konstruieren (computer-aided design)	4
CAE	Rechnergestützte Entwicklung (computer-aided engineering)	2
CPP	Orthogonale Projektion (closest point projection)	86
DAE	Algebro-Differentialgleichungssystem	5
DIRKN	Diagonal-implizite Runge-Kutta-Nyström Verfahren	175
DIRK	Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren	6
DOP	Diskret orientiertes Polytop	334
DSC	Differential-Scanning-Calorimeter	398
ODE	Gewöhnliche Differentialgleichung	5
FEA	Finite-Elemente-Analyse	2
FEM	Finite-Elemente-Methode	1
FE	Finite-Elemente	12
Gen- α	Generalized- α Methode	7
GENERIC	Spezielle Struktur von Systemgleichungen (General Equilibrium Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling)	8
IRK	Implizite Runge-Kutta Verfahren	170
BE	Implizites Euler-Verfahren	5
LBB	Ladyženskaja-Babuška-Brezzi-Stabilitätsbedingung	148
LGS	Lineares Gleichungssystem	137
LIRK	Linear-implizite Runge-Kutta Verfahren	142
BLAS	Programmbibliothek zur Durchführung elementarer Operationen der linearen Algebra	349

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
CRS	Speicherformat für dünnbesetzte Matrizen (compressed sparse row)	349
LAPACK	Programmbibliothek mit Algorithmen aus dem Bereich der numerischen linearen Algebra	349
PARDISO	Leistungsfähiger Gleichungslöser zur Lösung großer linearer Gleichungssysteme mit dünnbesetzten Matrizen	349
MKL	Programmbibliothek für mathematische Berechnungen von der Firma Intel (math kernel library)	349
MOL	Linienmethode (method of lines)	135
MLNA	Multilevel-Newton-Algorithmus	5
NTN	Knoten-zu-Knoten Ansatz für räumliche Kontaktdiskretisierung (node-to-node)	8
NTS	Knoten-zu-Segment Ansatz für räumliche Kontaktdiskretisierung (node-to-segment)	8
NURBS	Nicht-uniforme rationale B-Splines (non-uniform rational basis spline)	4
OpenMP	Programmierschnittstelle für die Shared-Memory-Programmierung (open multi-processing)	349
PDE	Partielle Differentialgleichung	5
PvT	Prinzip der virtuellen Temperaturen	107
PvV	Prinzip der virtuellen Verschiebungen	140
RKN	Runge-Kutta-Nyström Verfahren	174
RK	Runge-Kutta Verfahren	6
RWP	Randwertproblem	428
SDIRKN	Einfach diagonal-implizite Runge-Kutta-Nyström Verfahren	362
SDIRK	Einfach diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren	172
SDOF	Einfreiheitsgradsystem (single degree of freedom system)	351
STS	Knoten-zu-Knoten Ansatz für räumliche Kontaktdiskretisierung (segment-to-segment)	9

Skalare

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
c_p	Spezifische Wärmekapazität	59
da	Materielles Flächenelement in χ_t	22
dA	Materielles Flächenelement in \mathcal{R}	22
dv	Materielles Volumenelement in χ_t	23
dV	Materielles Volumenelement in \mathcal{R}	23
E	Innere Energie	41
e	Spezifische innere Energie	41

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
E_{tot}	Gesamtenergie bzw. totale Energie	41
f_{τ}	Gleitfunktion	92
g	Abstandsfunktion	85
H	Entropiezufuhr infolge des Wärmetransports	43
J	Determinante des Deformationsgradienten \mathbf{F}	22
K	Kinetische Energie	40
L_{a}	Externe mechanische Leistung	40
L_{i}	Spannungsleistung	40
m	Masse	34
p_{i}	Spezifische Spannungsleistung	40
p_{N}	Kontaktdruck	90
p_{Θ}	Wärmeproduktion infolge thermomechanischer Kopplung	59
Q	Wärme	41
q	Wärmeflussdichte in χ_t	30
$q_{\mathcal{R}}$	Wärmeflussdichte in \mathcal{R}	30
r_{Θ}	Volumetrische Wärmequelle	41
S	Entropie eines materiellen Körpers	43
s	Spezifische Entropie eines materiellen Körpers	43
t	Zeit	16
t_{e}	Endzeitpunkt	85
t_0	Anfangszeitpunkt	17
(X_1, X_2, X_3)	Kartesische Koordinaten in materieller Darstellung	17
(x_1, x_2, x_3)	Kartesische Koordinaten in räumlicher Darstellung	17
λ_{N}	Normalanteil des Lagrange-Multiplikatorfeldes	114
$\delta\lambda_{\text{N}}$	Normalanteil des virtuellen Lagrange-Multiplikatorfeldes	114
μ_{c}	Reibkoeffizient	92
δ	Innere Dissipation	44
Γ	Entropieproduktion	43
γ	Spezifische Entropieproduktion	43
κ	Wärmeleitfähigkeit	58
$\hat{\psi}$	Helmholtz-Energie	45
ϱ	Massendichte in χ_t	34
$\varrho_{\mathcal{R}}$	Massendichte in \mathcal{R}	34
σ	Volumenverteilte Entropiezufuhr	43
Θ	Temperaturfeld	43
$\delta\Theta$	Virtuelles Temperaturfeld	106

Geometrische Vektoren

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
\vec{a}	Beschleunigungsfeld	20
$d\vec{a}$	Materieller Flächenelementvektor in χ_t	22

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$d\vec{A}$	Materieller Flächenelementvektor in \mathcal{R}	22
$\vec{D}_{\vec{c}}$	Drehimpulsvektor	37
$d\vec{x}$	Materielles Linienelement in χ_t	21
$d\vec{X}$	Materielles Linienelement in \mathcal{R}	21
\vec{e}_i	Kartesische Basisvektoren	17
\vec{F}	Fluss in allgemeiner Bilanzgleichung	33
\vec{F}_r	Resultierender Kraftvektor	36
\vec{g}	Abstandsvektor	85
\vec{g}^i	Kontravariante Basisvektoren in χ_t	1
\vec{g}_i	Kovariante Basisvektoren in χ_t	1
\vec{G}	Physikalische Bilanzgröße	32
\vec{I}	Impulsvektor	36
$\vec{M}_{\vec{c}}$	Resultierendes Moment	37
\vec{n}	Normalenvektor in χ_t	22
\vec{n}_R	Normalenvektor in \mathcal{R}	22
\vec{P}	Produktionsterm in allgemeiner Bilanzgleichung	33
\vec{q}	Cauchy'scher Wärmeflussvektor	30
\vec{q}_R	Piola-Kirchhoffscher Wärmeflussvektor	31
\vec{S}	Zuführungsterm in allgemeiner Bilanzgleichung	33
$\vec{t}_c^{(1)}$	Slave-seitige Oberflächenspannung im Kontakt-Interface	90
$\vec{t}_c^{(2)}$	Master-seitige Oberflächenspannung im Kontakt-Interface	90
\vec{t}	Spannungsvektor in χ_t	28
\vec{t}_R	Spannungsvektor in \mathcal{R}	30
\vec{t}_τ	Slave-seitige Tangentialspannung im Kontakt-Interface	90
\vec{u}	Verschiebungsfeld	18
$\delta\vec{u}$	Virtuelles Verschiebungsfeld	103
\vec{v}	Geschwindigkeitsfeld	19
\vec{v}_τ	Tangentialer Relativgeschwindigkeitsvektor	89
\vec{x}	Ortsvektor eines materiellen Punktes in χ_t	17
\vec{X}	Ortsvektor eines materiellen Punktes in \mathcal{R}	17
$\vec{\lambda}$	Lagrange-Multiplikatorfeld	113
$\delta\vec{\lambda}$	Virtuelles Lagrange-Multiplikatorfeld	114
$\vec{\lambda}_\tau$	Tangentialanteil des Lagrange-Multiplikatorfeldes	114
$\delta\vec{\lambda}_\tau$	Tangentialanteil des virtuellen Lagrange-Multiplikatorfeldes	114
$\vec{\pi}$	Volumendichteverteilung des Produktionsterms in χ_t	33
$\vec{\pi}_R$	Volumendichteverteilung des Produktionsterms in \mathcal{R}	33
$\vec{\tau}_\eta$	Tangentenvektor	89

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$\vec{\tau}_\eta$	Tangentenvektor	89
$\vec{\chi}_R$	Bewegung des materiellen Körpers	18
$\vec{\chi}_{\Gamma_c}$	Projektionsabbildung	86
$\vec{\chi}_{\gamma_c}$	Projektionsabbildung	87
$\vec{\psi}$	Volumendichteverteilung der Bilanzgröße \vec{G} in χ_t	32
$\vec{\psi}_R$	Volumendichteverteilung der Bilanzgröße \vec{G} in \mathcal{R}	32
$\vec{\sigma}$	Volumendichteverteilung des Zuführungsterms in χ_t	33
$\vec{\sigma}_R$	Volumendichteverteilung des Zuführungsterms in \mathcal{R}	33
$\vec{\Sigma}$	Oberflächenverteilter Entropiefluss	43

Tensoren

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$\mathbf{1}$	Einheitstensor	23
\mathbf{A}	Almansischer Verzerrungstensor	25
\mathbf{B}	Linker Cauchy-Green Tensor	24
$\overline{\mathbf{B}}$	Unimodularer linker Cauchy-GreenTensor	24
\mathbf{C}	Rechter Cauchy-Green Tensor	24
$\overline{\mathbf{C}}$	Unimodularer rechter Cauchy-Green Tensor	24
\mathbf{D}	Symmetrischer Verzerrungsgeschwindigkeitstensor	26
\mathbf{E}	Greenscher Verzerrungstensor	25
$\delta\mathbf{E}$	Variation des Greenschen Verzerrungstensors	105
\mathbf{E}_L	Linearisierter Verzerrungstensor	47
\mathbf{F}	Deformationsgradient	21
$\overline{\mathbf{F}}$	Isochorer Anteil des Deformationsgradienten	24
$\hat{\mathbf{F}}$	Volumetrischer Anteil des Deformationsgradienten	24
\mathbf{H}	Verschiebungsgradient	23
$\delta\mathbf{h}$	Räumlicher Gradient der virtuellen Verschiebungen	106
\mathbf{L}	Räumlicher Geschwindigkeitsgradient	26
\mathbf{R}	Rotationstensor aus der polaren Zerlegung von \mathbf{F}	23
\mathbf{R}_L	Linearisierter Rotationstensor	47
\mathbf{T}_R	Erster Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	30
\mathbf{T}	Cauchyscher Spannungstensor	29
\mathbf{S}	Kirchhoffscher Spannungstensor	29
$\tilde{\mathbf{T}}$	Zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	30
\mathbf{U}	Rechter Strecktensor aus der polaren Zerlegung von \mathbf{F}	23
$\overline{\mathbf{U}}$	Unimodularer rechter Strecktensor	24
\mathbf{V}	Linker Strecktensor aus der polaren Zerlegung von \mathbf{F}	23
$\overline{\mathbf{V}}$	Unimodularer linker Strecktensor	24
\mathbf{W}	Antisymmetrischer Drehgeschwindigkeits- oder Wirbel-tensor	26

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
κ_R	Wärmeleitfähigkeit in \mathcal{R}	59
Φ	Tensorfeld zur Beschreibung des Flusses in χ_t	33
Φ_R	Tensorfeld zur Beschreibung des Flusses in \mathcal{R}	33

FEM-Raumdiskretisierung

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
n^e	Anzahl von finiten Elementen für eine gegebene Vernetzung	142
n^n	Anzahl von Knoten für eine gegebene Vernetzung	143
n_M^n	Anzahl von Knoten auf der Master-Oberfläche	226
n_S^n	Anzahl von Knoten auf der Slave-Oberfläche	226
n_{ua}	Gesamtanzahl der Verschiebungsfreiheitsgrade	146
n_{uu}	Anzahl unbekannter Verschiebungsfreiheitsgrade	147
n_{uuM}	Anzahl unbekannter Verschiebungsfreiheitsgrade auf der Master-Oberfläche	226
n_{uuS}	Anzahl unbekannter Verschiebungsfreiheitsgrade auf der Slave-Oberfläche	226
n_{up}	Anzahl bekannter Verschiebungsfreiheitsgrade	147
$n_{\Theta a}$	Gesamtanzahl der Temperaturfreiheitsgrade	148
$n_{\Theta u}$	Anzahl unbekannter Temperaturfreiheitsgrade	148
$n_{\Theta p}$	Anzahl bekannter Temperaturfreiheitsgrade	148
n_{en}	Anzahl Knoten pro Element	144
n_u^e	Anzahl Verschiebungsfreiheitsgrade pro Element	146
n_Θ^e	Anzahl Temperaturfreiheitsgrade pro Element	149
n_Q	Gesamtanzahl der inneren Variablen	152
n_q	Anzahl der inneren Variablen an einem einzelnen Punkt	152
$\hat{\mathbf{B}}$	$\in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uu}}$, Interface-Operator	232
\mathbf{C}_κ	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}}$, Thermische Konduktivitätsmatrix	157
$\overline{\mathbf{C}}_\kappa$	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta p}}$, Thermische Konduktivitätsmatrix	157
\mathbf{C}_N	$\in \mathbb{R}^{n_s^n}$, Semidiskrete Normalkontaktbedingungen	299
\mathbf{C}_p	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta u}}$, Kapazitätsmatrix	156
$\overline{\mathbf{C}}_p$	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u} \times n_{\Theta p}}$, Kapazitätsmatrix	156
\mathbf{C}_T	$\in \mathbb{R}^{(n_{uuS} - n_s^n)}$, Semidiskrete Tangentialkontaktbedingungen	299
$\hat{\mathbf{D}}$	$\in \mathbb{R}^{n_{uuS} \times n_{uuS}}$, Mortar-Kopplungsmatrix	231
\mathbf{f}_c	$\in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, Semidiskreter Kontaktkraftvektor	232
\mathbf{f}_{ext}	$\in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, Semidiskreter Kraftvektor (externe Lasten)	154
\mathbf{f}_{int}	$\in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, Semidiskreter Kraftvektor (innere Kräfte)	150

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
\mathbf{f}_{kin}	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, Semidiskreter Kraftvektor (Massenträgheitskräfte)	153
\mathbf{g}_{u}	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, Semidiskreter Kraftvektor	156
\mathbf{M}	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\text{uu}}}$, Massenmatrix	154
$\bar{\mathbf{M}}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}} \times n_{\text{up}}}$, Massenmatrix	154
$\hat{\mathbf{M}}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}} \times n_{\text{uuM}}}$, Mortar-Kopplungsmatrix	231
N_j	Ansatzfunktion am globalen Knoten j zur Interpolation von \mathbf{u}^h , $\delta \mathbf{u}^h$, Θ^h und $\delta \Theta^h$	143
\mathbf{N}_{u}^e	$\in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{u}}^e}$, Matrix mit Ansatzfunktionen zur Interpolation von \mathbf{u}^h und $\delta \mathbf{u}^h$ im Element e	146
\mathbf{N}_{Θ}^e	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta}^e}$, Matrix mit Ansatzfunktionen zur Interpolation von Θ^h und $\delta \Theta^h$ im Element e	149
\mathbf{p}_{c_p}	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Semidiskreter Leistungsvektor (Wärmespeicherung)	156
\mathbf{p}_{κ}	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Semidiskreter Leistungsvektor (Wärmeleitung)	157
$\mathbf{p}_{r_{\Theta}}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Semidiskreter Leistungsvektor (Zu- bzw. Abführen von Wärme über Quellen bzw. Senken)	158
$\mathbf{p}_{\Theta q}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Semidiskreter Leistungsvektor (Wärmeübergang an der Oberfläche)	158
\mathbf{q}	$\in \mathbb{R}^{n_Q}$, Gesamtvektor aller inneren Variablen der Struktur	152
\mathbf{q}	$\in \mathbb{R}^{n_q}$, Vektor der inneren Variablen, ausgewertet an einem einzelnen Punkt	152
\mathbf{r}_Q	$\in \mathbb{R}^{n_Q}$, Rechte Seite des ODE-Systems für \mathbf{q}	153
\mathbf{r}_{Θ}	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Rechte Seite der semidiskreten Wärmeleitungsgleichung	159
\mathbf{u}^h	$\in \mathbb{R}^3$, Raumdiskretisiertes Verschiebungsfeld	143
\mathbf{u}_{a}	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{ua}}}$, Gesamtvektor der Knotenverschiebungen	146
\mathbf{u}	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, Unbekannte Knotenverschiebungen	147
\mathbf{u}_{M}	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}}$, Unbekannte Knotenverschiebungen auf der Master-Oberfläche	230
\mathbf{u}_{S}	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuS}}}$, Unbekannte Knotenverschiebungen auf der Slave-Oberfläche	230
$\bar{\mathbf{u}}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{up}}}$, Bekannte Knotenverschiebungen	147
\mathbf{u}_j	$\in \mathbb{R}^3$, Knotenverschiebung am globalen Knoten j	144
\mathbf{u}^e	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{u}}^e}$, Knotenverschiebungen des Elements e	146
$\delta \mathbf{u}^h$	$\in \mathbb{R}^3$, Raumdiskretisiertes virtuelles Verschiebungsfeld	143
$\delta \mathbf{u}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uu}}}$, Virtuelle Knotenverschiebungen	147
$\delta \mathbf{u}_{\text{M}}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\text{uuM}}}$, Virtuelle Knotenverschiebungen auf der Master-Oberfläche	230

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$\delta \mathbf{u}_S$	$\in \mathbb{R}^{n_{us}}$, Virtuelle Knotenverschiebungen auf der Slave-Oberfläche	230
$\delta \mathbf{u}_j$	$\in \mathbb{R}^3$, Virtuelle Knotenverschiebung am globalen Knoten j	144
$\delta \mathbf{u}^e$	$\in \mathbb{R}^{n_u^e}$, Virtuelle Knotenverschiebungen des Elements e	146
\mathbf{v}	$\in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, Unbekannte Knotengeschwindigkeiten	174
\mathbf{Z}_{ua}^e	$\in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{ua}}$, Koinzidenzmatrix	147
\mathbf{Z}_u^e	$\in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{uu}}$, Koinzidenzmatrix	147
$\bar{\mathbf{Z}}_u^e$	$\in \mathbb{R}^{n_u^e \times n_{up}}$, Koinzidenzmatrix	147
$\mathbf{Z}_{\Theta a}^e$	$\in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_{\Theta a}}$, Koinzidenzmatrix	148
\mathbf{Z}_Θ^e	$\in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_{\Theta u}}$, Koinzidenzmatrix	148
$\bar{\mathbf{Z}}_\Theta^e$	$\in \mathbb{R}^{n_\Theta^e \times n_{\Theta p}}$, Koinzidenzmatrix	148
$\mathbf{Z}_q^{e(k)}$	$\in \mathbb{R}^{n_q \times n_Q}$, Koinzidenzmatrix zum Filtern der inneren Variablen	153
$\boldsymbol{\lambda}^h$	Raumdiskretisiertes Lagrange-Multiplikatorfeld	228
$\boldsymbol{\lambda}$	$\in \mathbb{R}^{n_{us}}$, Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgrade an sämtlichen Slave-Knoten	229
$\delta \boldsymbol{\lambda}$	$\in \mathbb{R}^{n_{us}}$, Virtuelle Lagrange-Multiplikatorfreiheitsgrade an sämtlichen Slave-Knoten	229
$\delta \boldsymbol{\lambda}^h$	Raumdiskretisiertes Feld der Lagrange-Multiplikatorvariation	228
Ξ_r	Ansatzfunktion am globalen Slave-Knoten $r \in \mathcal{S}$ zur Interpolation von $\boldsymbol{\lambda}^h$ und $\delta \boldsymbol{\lambda}^h$	228
Γ^h	Berandung der räumlich diskretisierten Struktur in der Referenzkonfiguration	143
γ^h	Berandung der räumlich diskretisierten Struktur in der Momentankonfiguration	143
Γ^e	Berandung eines finiten Elements in der Referenzkonfiguration	143
γ^e	Berandung eines finiten Elements in der Referenzkonfiguration	143
$\Gamma_c^{h(2)}$	Räumlich diskretisierte Master-Oberfläche in der Referenzkonfiguration	226
$\gamma_c^{h(2)}$	Räumlich diskretisierte Master-Oberfläche in der Momentankonfiguration	226
$\Gamma_c^{h(1)}$	Räumlich diskretisierte Slave-Oberfläche in der Referenzkonfiguration	226
$\gamma_c^{h(1)}$	Räumlich diskretisierte Slave-Oberfläche in der Momentankonfiguration	226

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
Ω^h	Volumen der räumlich diskretisierten Struktur in der Referenzkonfiguration	143
ω^h	Volumen der räumlich diskretisierten Struktur in der Momentankonfiguration	143
Ω^e	Volumen eines finiten Elements in der Referenzkonfiguration	143
ω^e	Volumen eines finiten Elements in der Momentankonfiguration	143
ξ	Lokale Koordinate	144
Θ^h	Raumdiskretisiertes Temperaturfeld	148
Θ_a	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta a}}$, Gesamtvektor der Knotentemperaturen	148
Θ	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Unbekannte Knotentemperaturen	148
$\bar{\Theta}$	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta p}}$, Bekannte Knotentemperaturen	148
Θ_j	Knotentemperatur am globalen Knoten j	148
Θ^e	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta^e}}$, Knotentemperaturen des Elements e	149
$\delta\Theta^h$	Raumdiskretisiertes virtuelles Temperaturfeld	148
$\delta\Theta$	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Virtuelle Knotentemperaturen	148
$\delta\Theta_j$	Virtuelle Knotentemperatur am globalen Knoten j	148
$\delta\Theta^e$	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta^e}}$, Virtuelle Knotentemperaturen des Elements e	149
\mathcal{S}	Globaler Knotensatz aller Slave-Knoten	226
\mathcal{M}	Globaler Knotensatz aller Master-Knoten	226
\mathcal{N}	Globaler Knotensatz nicht mit \mathcal{S} und \mathcal{M} assozierbarer Knoten	226
\mathcal{A}	Globaler Knotensatz aller aktiven Slave-Knoten	293
\mathcal{I}	Globaler Knotensatz aller inaktiven Slave-Knoten	293
\mathcal{H}	Globaler Knotensatz aller haftenden aktiven Slave-Knoten	297
\mathcal{G}	Globaler Knotensatz aller gleitenden aktiven Slave-Knoten	297

Zeitdiskretisierung und Lösungsprozedur

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
\mathbf{C}_N	$\in \mathbb{R}^{n_s^n}$, Zeitdiskretisierte Normalkontaktbedingungen	308
$\tilde{\mathbf{C}}_T$	$\in \mathbb{R}^{(n_{uuS}-n_s^n)}$, Zeitdiskretisierte Tangentialkontaktbedingungen	308
\mathbf{f}	$\in \mathbb{R}^m$, Rechte Seite des allgemeinen Prototyp-ODE-Systems erster Ordnung	169
\mathbf{G}	Effektive Strukturgleichungen	178
\mathbf{G}_u	$\in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, Effektive mechanische Strukturgleichungen	176
\mathbf{G}_{Θ}	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Effektive thermische Strukturgleichungen	176

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
K	Funktionalmatrix	199
L	$\in \mathbb{R}^{n_Q}$, Zeitdiskretisierte Evolutionsgleichungen sämtlicher innerer Variablen	176
m	Dimension des allgemeinen Prototyp-ODE-Systems erster Ordnung	169
Q	$\in \mathbb{R}^{n_Q}$, Lösungsvektor sämtlicher innerer Variablen	174
t_n	Zeitintervallanfang des Zeitschritts n	169
t_{n+1}	Zeitintervallende des Zeitschritts n	169
Δt_n	Zeitschrittweite	169
T_{ni}	Stufenzeitpunkt eines DIRK-Verfahrens	176
$T_{n+\alpha_m}$	Zeitpunkt innerhalb der Verfahrensvorschrift der Generalized- α Methode	180
$T_{n+\alpha_f}$	Zeitpunkt innerhalb der Verfahrensvorschrift der Generalized- α Methode	180
U	$\in \mathbb{R}^{n_{uu}}$, Lösungsvektor der unbekannten Knotenverschiebungen	174
y	$\in \mathbb{R}^m$, Lösungsvariable für allgemeines Prototyp-ODE-System erster Ordnung	169
Λ	$\in \mathbb{R}^{n_{uus}}$, Lösungsvektor der diskreten Lagrange-Multiplikatoren	301
Θ	$\in \mathbb{R}^{n_{\Theta u}}$, Lösungsvektor der unbekannten Knotentemperaturen	174

Verschiedenes

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
B	Materieller Körper	15
\mathbb{E}^3	Dreidimensionaler Euklidischer Punktraum	17
\mathbb{V}^3	Dreidimensionaler Euklidischer Vektorraum	17
K	Menge von Konfigurationen	16
O	Ursprung des Bezugssystems	17
P	Partikel oder materieller Punkt	16
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen	16
R	Referenzkonfiguration des materiellen Körpers	16
R [B]	Integrationsgebiet über das Volumen des materiellen Körpers in R	32
$\partial \mathbf{R}$ [B]	Integrationsgebiet über die Oberfläche des materiellen Körpers in R	33
χ	Konfiguration eines materiellen Körpers	16
χ_t	Momentankonfiguration des materiellen Körpers	16
χ_t [B]	Integrationsgebiet über das Volumen des materiellen Körpers in χ_t	32

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$\partial\chi_t[\mathcal{B}]$	Integrationsgebiet über die Oberfläche des materiellen Körpers in χ_t	33
χ_{t_0}	Ausgangskonfiguration des materiellen Körpers	17
\mathbb{I}	Zeitintervall	85

Operatoren

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$\vec{a} \times \vec{b}$	Kreuzprodukt zwischen zwei Vektoren	
$f'(x)$	Ableitung von f bezüglich x	
$\partial f(x, y)/\partial x$	Partielle Ableitung von $f(x, y)$ bezüglich x	
$df(x)/dx$	Totale Ableitung von $f(x)$ bezüglich x	
$\frac{d}{dt}f$	Materielle Zeitableitung von f	
\dot{f}	Materielle Zeitableitung von f	
$\overset{\Delta}{\mathbf{A}}$	Kovariante Oldroyd-Ableitung $\overset{\Delta}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L}$	
$\overset{\nabla}{\mathbf{A}}$	Kontravariante Oldroyd-Ableitung $\overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} - \mathbf{L} \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{L}^T$	
div	Divergenz-Operator in Bezug auf die Momentankonfiguration	
Div	Divergenz-Operator in Bezug auf die Referenzkonfiguration	
\otimes	Dyadisches Produkt	
Grad	Gradient Operator in Bezug auf die Referenzkonfiguration	
grad	Gradient Operator in Bezug auf die Momentankonfiguration	
$\vec{a} \cdot \vec{b}$	Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren	
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$	Skalarprodukt zwischen zwei Tensoren zweiter Stufe	
$\ \mathbf{A}\ _F = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$	Frobenius-Norm eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{A}	
$\ \vec{v}\ = \sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}}$	Euklidische Vektornorm	
$\text{tr } \mathbf{A}$	Spur eines Tensors	
\mathbf{A}^T	Transposition eines Tensors	
\mathbf{A}^{-1}	Inverse eines Tensors	
\mathbf{A}^D	Deviator eines Tensors	

Indizes

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$(\cdot)_n$	Diskreter Zeitindex für t_n	
$(\cdot)_{n+1}$	Diskreter Zeitindex für t_{n+1}	
$(\cdot)_{ni}$	Diskreter Zeitindex für T_{ni}	
$(\cdot)_{n+\alpha_m}$	Diskreter Zeitindex für $T_{n+\alpha_m}$	

Bezeichnung	Beschreibung	Seiten
$(\cdot)_{n+\alpha_f}$	Diskreter Zeitindex für $T_{n+\alpha_f}$	
$(\cdot)^e$	Auswertung der Größe im Element e	
$(\cdot)^{e(k)}$	Auswertung der Größe im Element e am k -ten Integrationspunkt	
$(\cdot)^h$	Raumdiskretisierte Größe	
$(\cdot)^{(i)}$	Teilbereich	
$(\cdot)^{(1)}$	Auf der Slave-Seite definierte Größe bzw. eine Größe des mit der Slave-Seite verbundenen materiellen Körpers	
$(\cdot)^{(2)}$	Auf der Master-Seite definierte Größe bzw. eine Größe des mit der Master-Seite verbundenen materiellen Körpers	
$(\cdot)^{(m)}$	Größe des m -ten Iterationsschritts	

H Literaturverzeichnis

- El-Abbasi, N. und K.-J. Bathe [2001]. „Stability and patch test performance of contact discretizations and a new solution algorithm“. In: *Computers and Structures* 79.16, S. 1473–1486. DOI: [10.1016/S0045-7949\(01\)00048-7](https://doi.org/10.1016/S0045-7949(01)00048-7).
- Actis, R. L., B. A. Szabó und C. Schwab [1999]. „Hierarchic models for laminated plates and shells“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 172.1-4, S. 79–107. DOI: [10.1016/S0045-7825\(98\)00226-6](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00226-6).
- Adam, L. und J.-P. Ponthot [2002a]. „Numerical Simulation of Viscoplastic and Frictional Heating During Finite Deformation of Metal. Part I: Theory“. In: *Journal of Engineering Mechanics* 128.11, S. 1215–1221. DOI: [10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(2002\)128:11\(1215\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:11(1215)).
- Adam, L. und J.-P. Ponthot [2002b]. „Numerical Simulation of Viscoplastic and Frictional Heating During Finite Deformation of Metal. Part II: Applications“. In: *Journal of Engineering Mechanics* 128.11, S. 1222–1232. DOI: [10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(2002\)128:11\(1222\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:11(1222)).
- Adam, L. und J.-P. Ponthot [2005]. „Thermomechanical modeling of metals at finite strains: First and mixed order finite elements“. In: *International Journal of Solids and Structures* 42.21-22, S. 5615–5655. DOI: [10.1016/j.ijsolstr.2005.03.020](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2005.03.020).
- Adams, D. D. und W. L. Wood [1983]. „Comparison of Hilber-Hughes-Taylor and Bossak ‘ α -methods’ for the numerical integration of vibration equations“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 19.5, S. 765–771. DOI: [10.1002/nme.1620190510](https://doi.org/10.1002/nme.1620190510).
- Agelet de Saracibar, C. und M. Chiumenti [1999]. „On the numerical modeling of frictional wear phenomena“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 177.3-4, S. 401–426. DOI: [10.1016/S0045-7825\(98\)00390-9](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00390-9).
- Alart, P. und A. Curnier [1991]. „A mixed formulation for frictional contact problems prone to Newton like solution methods“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 92.3, S. 353–375. DOI: [10.1016/0045-7825\(91\)90022-X](https://doi.org/10.1016/0045-7825(91)90022-X).
- Alexander, R. [1977]. „Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for Stiff O.D.E.’s“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 14.6, S. 1006–1021. DOI: [10.1137/0714068](https://doi.org/10.1137/0714068).
- Altenbach, H. [2015]. *Kontinuumsmechanik: Einführung in die materialunabhängigen und materialabhängigen Gleichungen*. 3rd. Springer Berlin Heidelberg. URL: <https://books.google.de/books?id=H4fDCgAAQBAJ>.
- Altenbach, H., J. Altenbach und C. Münch [1991]. „Analyse des thermomechanischen Verhaltens von Festkörpern“. In: *Archive of Applied Mechanics* 61.4, S. 245–258. DOI: [10.1007/BF00794350](https://doi.org/10.1007/BF00794350).
- Andersen, K. A. und C. Bay [2006]. *A survey of algorithms for construction of optimal Heterogeneous Bounding Volume Hierarchies*. Technical Report. Department of

- Computer Science, University of Copenhagen. URL: <http://image.diku.dk/projects/media/christian.bay.kasper.andersen.06B.pdf>.
- Annarapu, C., M. Hautefeuille und J. E. Dolbow [2012]. „A robust Nitsche’s formulation for interface problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 225-228, S. 44–54. DOI: [10.1016/j.cma.2012.03.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.03.008).
- Archer, J. S. [1963]. „Consistent mass Matrix for Distributed Mass Systems“. In: *Journal of the Structural Division, ASCE* 89.4, S. 161–178. URL: <http://cedb.asce.org/CEDBsearch/record.jsp?dockkey=0013159>.
- Argyris, J. H. und I. S. Doltsinis [1981]. „On the natural formulation and analysis of large deformation coupled thermomechanical problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 25.2, S. 195–253. DOI: [10.1016/0045-7825\(81\)90084-0](https://doi.org/10.1016/0045-7825(81)90084-0).
- Argyris, J. H., L. E. Vaz und K. J. Willam [1981]. „INTEGRATED FINITE-ELEMENT ANALYSIS OF COUPLED THERMOVISCOPLASTIC PROBLEMS“. In: *Journal of Thermal Stresses* 4.2, S. 121–153. DOI: [10.1080/01495738108909960](https://doi.org/10.1080/01495738108909960).
- Armero, F. und E. Petőcz [1996]. „A new class of conserving algorithms for dynamic contact problems“. In: *ECCOMAS conference on numerical methods in engineering*. Hrsg. von J.-A. Désidéri, P. LeTallec, E. Oñate, E. Périaux und E. Stein. Paris: John Wiley & Sons, Ltd., S. 861–867.
- Armero, F. und E. Petőcz [1999]. „A new dissipative time-stepping algorithm for frictional contact problems: formulation and analysis“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 179.1-2, S. 151–178. DOI: [10.1016/S0045-7825\(99\)00036-5](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00036-5).
- Armero, F. und J. C. Simo [1992]. „A new unconditionally stable fractional step method for non-linear coupled thermomechanical problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 35.4, S. 737–766. DOI: [10.1002/nme.1620350408](https://doi.org/10.1002/nme.1620350408).
- Armero, F. und J. C. Simo [1993]. „A priori stability estimates and unconditionally stable product formula algorithms for nonlinear coupled thermoplasticity“. In: *International Journal of Plasticity* 9.6, S. 749–782. DOI: [10.1016/0749-6419\(93\)90036-P](https://doi.org/10.1016/0749-6419(93)90036-P).
- Armero, F. und E. Petőcz [1998]. „Formulation and analysis of conserving algorithms for frictionless dynamic contact/impact problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 158.3-4, S. 269–300. DOI: [10.1016/S0045-7825\(97\)00256-9](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00256-9).
- Armstrong, P. J. und C. O. Frederick [1966]. *A Mathematical Representation of the Multiaxial Bauschinger Effect*. Techn. Ber. G.E.G.B. Report RD/B/N731, Berkeley Nuclear Laboratories, UK. URL: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1179/096034007X207589?journalCode=ymht20>.
- Arnold, M. und O. Brüls [2007]. „Convergence of the generalized- α scheme for constrained mechanical systems“. In: *Multibody System Dynamics* 18.2, S. 185–202. DOI: [10.1007/s11044-007-9084-0](https://doi.org/10.1007/s11044-007-9084-0).
- Ascher, U. M. und L. R. Petzold [1998]. *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential - Algebraic Equations*. Philadelphia: SIAM.
- Atkin, R. J. und N. Fox [1980]. *An introduction to the theory of elasticity*. London, New York: Longman.

-
- Auricchio, F., L. Beirão da Veiga, T. Hughes, A. Reali und G. Sangalli [2012a]. „Isogeometric collocation for elastostatics and explicit dynamics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 249-252, S. 2–14. DOI: [10.1016/j.cma.2012.03.026](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.03.026).
- Auricchio, F., F. Calabrò, T. J. R. Hughes, A. Reali und G. Sangalli [2012b]. „A simple algorithm for obtaining nearly optimal quadrature rules for NURBS-based isogeometric analysis“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 249-252, S. 15–27. DOI: [10.1016/j.cma.2012.04.014](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.04.014).
- Babuška, I. und T. Strouboulis [2001]. *The finite element method and its reliability*. Oxford University Press.
- Babuška, I., B. A. Szabó und I. N. Katz [1981]. „The p-Version of the Finite Element Method“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 18.3, S. 515–545. URL: <http://www.jstor.org/stable/2156869>.
- Babuška, I. und B. A. Szabó [1982]. „On the rates of convergence of the finite element method“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 18.3, S. 323–341. DOI: [10.1002/nme.1620180302](https://doi.org/10.1002/nme.1620180302).
- Bandeira, A. A., P. Wriggers und P. de Mattos Pimenta [2004]. „Numerical derivation of contact mechanics interface laws using a finite element approach for large 3D deformation“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 59.2, S. 173–195. DOI: [10.1002/nme.867](https://doi.org/10.1002/nme.867).
- Bathe, K. J. [2002]. *Finite-Elemente-Methoden*. 2nd. Berlin: Springer.
- Bathe, K. J. und E. L. Wilson [1972]. „Stability and accuracy analysis of direct integration methods“. In: *Earthquake Engineering and Structural Dynamics* 1.3, S. 283–291. DOI: [10.1002/eqe.4290010308](https://doi.org/10.1002/eqe.4290010308).
- Bathe, K.-J. und A. Chaudhary [1985]. „A solution method for planar and axisymmetric contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 21.1, S. 65–88. DOI: [10.1002/nme.1620210107](https://doi.org/10.1002/nme.1620210107).
- Bauchau, O. A., G. Damilano und N. J. Theron [1995]. „Numerical integration of non-linear elastic multi-body systems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 38.16, S. 2727–2751. DOI: [10.1002/nme.1620381605](https://doi.org/10.1002/nme.1620381605).
- Bazilevs, Y., V. M. Calo, J. A. Cottrell, J. A. Evans, T. J. R. Hughes, S. Lipton, M. A. Scott und T. W. Sederberg [2010]. „Isogeometric analysis using T-splines“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.5-8, S. 229–263. DOI: [10.1016/j.cma.2009.02.036](https://doi.org/10.1016/j.cma.2009.02.036).
- Becker, E. B., C. F. Carey und J. T. Oden [1981]. *Finite Elements. An Introduction, Vol. I*. New Jersey: Prentice Hall, Englewood Cliffs.
- Becker, R., P. Hansbo und R. Stenberg [2003]. „A finite element method for domain decomposition with non-matching grids“. In: *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 37.2, S. 209–225. DOI: [10.1051/m2an:2003023](https://doi.org/10.1051/m2an:2003023).
- Belgacem, F. B., P. Hild und P. Laborde [1998]. „The mortar finite element method for contact problems“. In: *Mathematical and Computer Modelling* 28.4-8, S. 263–271. DOI: [10.1016/S0895-7177\(98\)00121-6](https://doi.org/10.1016/S0895-7177(98)00121-6).
- Belgacem, F. B. [1999]. „The Mortar finite element method with Lagrange multipliers“. In: *Numerische Mathematik* 84.2, S. 173–197. DOI: [10.1007/s002110050468](https://doi.org/10.1007/s002110050468).
- Belytschko, T. [1983]. „An overview of semidiscretization and time integration procedures“. In: *Computational Methods for Transient Analysis* 1. Hrsg. von T. Belytschko und

- T. J. R. Hughes, S. 1–65. URL: https://www.researchgate.net/publication/265681753_An_overview_of_semidiscretization_and_time_integration_procedures.
- Belytschko, T., W. K. Liu und B. Moran [2000]. *Nonlinear finite elements for continua and structures*. Chichester: John Wiley & Sons.
- Belytschko, T. und D. F. Schoeberle [1975]. „On the Unconditional Stability of an Implicit Algorithm for Nonlinear Structural Dynamics“. In: *Journal of Applied Mechanics* 42.4, S. 865. DOI: [10.1115/1.3423721](https://doi.org/10.1115/1.3423721).
- Ben Belgacem, F. [2000]. „Numerical Simulation of Some Variational Inequalities Arisen from Unilateral Contact Problems by the Finite Element Methods“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 37.4, S. 1198–1216. DOI: [10.1137/S0036142998347966](https://doi.org/10.1137/S0036142998347966).
- Benson, D. J. und J. O. Hallquist [1990]. „A single surface contact algorithm for the post-buckling analysis of shell structures“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 78.2, S. 141–163. DOI: [10.1016/0045-7825\(90\)90098-7](https://doi.org/10.1016/0045-7825(90)90098-7).
- Benzi, M., G. H. Golub und J. Liesen [2005]. „Numerical solution of saddle point problems“. In: *Acta Numerica* 14, S. 1–137. DOI: [10.1017/S0962492904000212](https://doi.org/10.1017/S0962492904000212).
- Bergan, P. und E. Mollestad [1985]. „An automatic time-stepping algorithm for dynamic problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 49.3, S. 299–318. DOI: [10.1016/0045-7825\(85\)90127-6](https://doi.org/10.1016/0045-7825(85)90127-6).
- Bergen, G. V. D. [1997]. „Efficient Collision Detection of Complex Deformable Models using AABB Trees“. In: *Journal of Graphics Tools* 2.4, S. 1–13. DOI: [10.1080/10867651.1997.10487480](https://doi.org/10.1080/10867651.1997.10487480).
- Bergman, T. L., A. S. Lavine, F. P. Incropera und D. P. Dewitt [2011]. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 7th. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, S. 1072.
- Bernardi, C., Y. Maday und A. T. Patera [1993]. „Domain Decomposition by the Mortar Element Method“. In: *Asymptotic and Numerical Methods for Partial Differential Equations with Critical Parameters*. Hrsg. von H. G. Kaper, M. Garbey und G. W. Pieper. Dordrecht: Springer Netherlands, S. 269–286. DOI: [10.1007/978-94-011-1810-1_17](https://doi.org/10.1007/978-94-011-1810-1_17).
- Bernardi, C., Y. Maday und A. T. Patera [1994]. „A new nonconforming approach to domain decomposition: The mortar element method“. In: *Nonlinear partial differential equations and their applications Collège de France Seminar Volume 12*. Hrsg. von H. Brezis und J. L. Lions, S. 13–51.
- Bernardi, C., Y. Maday und F. Rapetti [2005]. „Basics and some applications of the mortar element method“. In: *GAMM-Mitteilungen* 28.2, S. 97–123. DOI: [10.1002/gamm.201490020](https://doi.org/10.1002/gamm.201490020).
- Bertram, A. und R. Glüge [2013]. *Festkörpermechanik*. Magdeburg, S. 295. URL: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:gbv:ma9:1-3025>.
- Betsch, P. und P. Steinmann [2001]. „Conservation properties of a time FE method—part II: Time-stepping schemes for non-linear elastodynamics“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 50.8, S. 1931–1955. DOI: [10.1002/nme.103](https://doi.org/10.1002/nme.103).
- Betten, J. [2003]. *Finite Elemente für Ingenieure 1*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. DOI: [10.1007/978-3-642-55536-7](https://doi.org/10.1007/978-3-642-55536-7).
- Betten, J. [2004]. *Finite Elemente für Ingenieure 2*. Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag. DOI: [10.1007/3-540-35030-6](https://doi.org/10.1007/3-540-35030-6).

-
- Birken, P., T. Gleim, D. Kuhl und A. Meister [2015]. „Fast solvers for unsteady thermal fluid structure interaction“. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 79.1, S. 16–29. DOI: [10.1002/flid.4040](https://doi.org/10.1002/flid.4040).
- Birken, P., K. J. Quint, S. Hartmann und A. Meister [2010]. „A time-adaptive fluid-structure interaction method for thermal coupling“. In: *Computing and Visualization in Science* 13.7, S. 331–340. DOI: [10.1007/s00791-010-0150-4](https://doi.org/10.1007/s00791-010-0150-4).
- Bonet, J. und R. D. Wood [2008]. *Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis*. Cambridge: Cambridge University Press. DOI: [10.1017/CB09780511755446](https://doi.org/10.1017/CB09780511755446).
- Borden, M. J., M. A. Scott, J. A. Evans und T. J. R. Hughes [2011]. „Isogeometric finite element data structures based on Bézier extraction of NURBS“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 87.1-5, S. 15–47. DOI: [10.1002/nme.2968](https://doi.org/10.1002/nme.2968).
- Borst, R. de, M. A. Crisfield, J. J. C. Remmers und C. V. Verhoosel [2012]. *Non-Linear Finite Element Analysis of Solids and Structures*. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd. DOI: [10.1002/9781118375938](https://doi.org/10.1002/9781118375938).
- Braess, D. [2007]. *Finite Elemente*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. DOI: [10.1007/978-3-540-72450-6](https://doi.org/10.1007/978-3-540-72450-6).
- Braess, D. und W. Dahmen [1998]. „Stability Estimates of the Mortar Finite Element Method for 3-Dimensional Problems“. In: *East-West J. Numer. Math* 6, S. 249–264.
- Braess, D., W. Dahmen und C. Wieners [1999]. „A Multigrid Algorithm for the Mortar Finite Element Method“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 37.1, S. 48–69. DOI: [10.1137/S0036142998335431](https://doi.org/10.1137/S0036142998335431).
- Burg, K., H. Haf, F. Wille und A. Meister [2017]. *Höhere Mathematik für Ingenieure Band I*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden. DOI: [10.1007/978-3-658-19428-4](https://doi.org/10.1007/978-3-658-19428-4).
- Burman, E. [2012]. „A Penalty-Free Nonsymmetric Nitsche-Type Method for the Weak Imposition of Boundary Conditions“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 50.4, S. 1959–1981. DOI: [10.1137/10081784X](https://doi.org/10.1137/10081784X).
- Burman, E., P. Hansbo und M. G. Larson [2016]. „The Penalty Free Nitsche Method and Nonconforming Finite Elements for the Signorini Problem“. In: *arXiv Vorabdruck:1609.03745*. arXiv: [1609.03745](https://arxiv.org/abs/1609.03745). URL: <http://arxiv.org/abs/1609.03745>.
- Butcher, J. C. [2008]. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. Chichester: John Wiley und Sons. DOI: [10.1002/9780470753767](https://doi.org/10.1002/9780470753767).
- Calvo, M. P. und C. Palencia [2002]. „Avoiding the Order Reduction of Runge-Kutta Methods for Linear Initial Boundary Value Problems“. In: *Mathematics of Computation* 71.240, S. 1529–1543. URL: <http://www.jstor.org/stable/4099962>.
- Campos, L. T., J. T. Oden und N. Kikuchi [1982]. „A numerical analysis of a class of contact problems with friction in elastostatics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 34.1-3, S. 821–845. DOI: [10.1016/0045-7825\(82\)90090-1](https://doi.org/10.1016/0045-7825(82)90090-1).
- Carey, G. F. und J. T. Oden [1983]. *Finite elements: A Second Course, Vol. II*. New Jersey: Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs.
- Carpenter, M. H., D. Gottlieb, S. Abarbanel und W.-S. Don [1995]. „The Theoretical Accuracy of Runge–Kutta Time Discretizations for the Initial Boundary Value Problem: A Study of the Boundary Error“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 16.6, S. 1241–1252. DOI: [10.1137/0916072](https://doi.org/10.1137/0916072).

- Carstens, S. und D. Kuhl [2012]. „Higher-order accurate implicit time integration schemes for transport problems“. In: *Archive of Applied Mechanics* 82.8, S. 1007–1039. DOI: [10.1007/s00419-012-0638-0](https://doi.org/10.1007/s00419-012-0638-0).
- Carstensen, C., O. Scherf und P. Wriggers [1999]. „Adaptive Finite Elements for Elastic Bodies in Contact“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 20.5, S. 1605–1626. DOI: [10.1137/S1064827595295350](https://doi.org/10.1137/S1064827595295350).
- Carstensen, C. und P. Wriggers, Hrsg. [2009]. *Mixed Finite Element Technologies*. Bd. 509. CISM International Centre for Mechanical Sciences. Vienna: Springer Vienna. DOI: [10.1007/978-3-211-99094-0](https://doi.org/10.1007/978-3-211-99094-0).
- Cash, J. R. [1979]. „Diagonally Implicit Runge-Kutta Formulae with Error Estimates“. In: *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications* 24.3, S. 293–301. DOI: [10.1093/imamat/24.3.293](https://doi.org/10.1093/imamat/24.3.293).
- Cavaleri, F. J. und A. Cardona [2013a]. „An augmented Lagrangian technique combined with a mortar algorithm for modelling mechanical contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 93.4, S. 420–442. DOI: [10.1002/nme.4391](https://doi.org/10.1002/nme.4391).
- Cavaleri, F. J. und A. Cardona [2013b]. „Three-dimensional numerical solution for wear prediction using a mortar contact algorithm“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 96.8, S. 467–486. DOI: [10.1002/nme.4556](https://doi.org/10.1002/nme.4556).
- Chaboche, J. L. und G. Rousselier [1983]. „On the plastic and viscoplastic constitutive equations - Part I Rules developed with internal variable concept“. In: *Journal of Pressure Vessel Technology* 105.2, S. 153–158. DOI: [10.1115/1.3264257](https://doi.org/10.1115/1.3264257).
- Chadwick, P. [1999]. *Continuum Mechanics*. New York: Dover Publications.
- Chapman, B., G. Jost und R. van der Pas [2008]. *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming*. Scientific and Engineering Computation Series. Cambridge, MA: The MIT Press.
- Chawla, V. und T. A. Laursen [1998]. „Energy consistent algorithms for frictional contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 42.5, S. 799–827. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19980715\)42:5<799::AID-NME385>3.0.CO;2-F](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19980715)42:5<799::AID-NME385>3.0.CO;2-F).
- Chouly, F. [2013]. *An adaptation of Nitsche’s method to the Tresca friction problem*. Techn. Ber. hal-00783827. HAL. URL: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00783827>.
- Chouly, F. [2014]. „An adaptation of Nitsche’s method to the Tresca friction problem“. In: *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 411.1, S. 329–339. DOI: [10.1016/j.jmaa.2013.09.019](https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2013.09.019).
- Chouly, F., M. Fabre, P. Hild, R. Mlika, J. Pousin und Y. Renard [2016]. *An overview of recent results on Nitsche’s method for contact problems*. Techn. Ber. <hal-01403003>. working paper or preprint. HAL. URL: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01403003>.
- Chouly, F. und P. Hild [2013]. „A Nitsche-Based Method for Unilateral Contact Problems: Numerical Analysis“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 51.2, S. 1295–1307. DOI: [10.1137/12088344X](https://doi.org/10.1137/12088344X).
- Chouly, F., P. Hild und Y. Renard [2014]. „Symmetric and non-symmetric variants of Nitsche’s method for contact problems in elasticity: theory and numerical experiments“.

-
- In: *Mathematics of Computation* 84.293, S. 1089–1112. DOI: [10.1090/S0025-5718-2014-02913-X](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-2014-02913-X).
- Chouly, F., R. Mlika und Y. Renard [2015]. *An unbiased Nitsche's approximation of the frictional contact between two elastic structures*. Techn. Ber. <hal-01240068>. HAL. URL: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01240068>.
- Christensen, P. W., A. Klarbring, J. S. Pang und N. Strömberg [1998]. „Formulation and comparison of algorithms for frictional contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 42.1, S. 145–173. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19980515\)42:1<145::AID-NME358>3.0.CO;2-L](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19980515)42:1<145::AID-NME358>3.0.CO;2-L).
- Chung, J. und G. M. Hulbert [1993]. „A Time Integration Algorithm for Structural Dynamics With Improved Numerical Dissipation: The Generalized- α Method“. In: *Journal of Applied Mechanics* 60, S. 371–375. DOI: [10.1115/1.2900803](https://doi.org/10.1115/1.2900803).
- Ciarlet, P. [2002]. *The finite element method for elliptic problems*. Society for Industrial und Applied Mathematics.
- Cichosz, T. und M. Bischoff [2011]. „Consistent treatment of boundaries with mortar contact formulations using dual Lagrange multipliers“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200.9-12, S. 1317–1332. DOI: [10.1016/j.cma.2010.11.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.11.004).
- Cichosz, T. [2012]. „Stabile und konsistente Kontaktmodellierung in Raum und Zeit“. Bericht Nr. 58. Institut für Baustatik und Baudynamik: Universität Stuttgart. URL: <http://d-nb.info/1037952081/34>.
- Coleman, B. D. [1964]. „Thermodynamics of materials with memory“. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 17.1. DOI: [10.1007/BF00283864](https://doi.org/10.1007/BF00283864).
- Coleman, B. D. und W. Noll [1963]. „The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity“. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 13.1, S. 167–178. DOI: [10.1007/BF01262690](https://doi.org/10.1007/BF01262690).
- Coleman, B. D. und M. E. Gurtin [1967]. „Thermodynamics with Internal State Variables“. In: *The Journal of Chemical Physics* 47.2, S. 597–613. DOI: [10.1063/1.1711937](https://doi.org/10.1063/1.1711937).
- Conde Martín, S. [2016]. „Energy-entropy-momentum time integration methods for coupled smooth dissipative problems“. Diss. Universidad Politécnica de Madrid. DOI: [10.20868/UPM.thesis.39399](https://doi.org/10.20868/UPM.thesis.39399).
- Conde Martín, S., P. Betsch und J. C. García Orden [2016]. „A temperature-based thermodynamically consistent integration scheme for discrete thermo-elastodynamics“. In: *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 32, S. 63–80. DOI: [10.1016/j.cnsns.2015.08.006](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2015.08.006).
- Cottrell, J. A., T. J. R. Hughes und Y. Bazilevs [2009]. *Isogeometric Analysis*. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd. DOI: [10.1002/9780470749081](https://doi.org/10.1002/9780470749081).
- Cowper, G. R. [1973]. „Gaussian quadrature formulas for triangles“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 7.3, S. 405–408. DOI: [10.1002/nme.1620070316](https://doi.org/10.1002/nme.1620070316).
- Crisfield, M. A. [2000]. „Re-visiting the contact patch test“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 48.3, S. 435–449. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(20000530\)48:3<435::AID-NME891>3.0.CO;2-V](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(20000530)48:3<435::AID-NME891>3.0.CO;2-V).
- Crisfield, M. A., U. Galvanetto und G. Jelenić [1997]. „Dynamics of 3-D co-rotational beams“. In: *Computational Mechanics* 20.6, S. 507–519. DOI: [10.1007/s004660050271](https://doi.org/10.1007/s004660050271).

- Crisfield, M. A. und J. Shi [1994]. „A co-rotational element/time-integration strategy for non-linear dynamics“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 37.11, S. 1897–1913. DOI: [10.1002/nme.1620371108](https://doi.org/10.1002/nme.1620371108).
- Crisfield, M. A. und J. Shi [1996]. „An energy conserving co-rotational procedure for non-linear dynamics with finite elements“. In: *Nonlinear Dynamics* 9.1, S. 37–52. DOI: [10.1007/BF01833292](https://doi.org/10.1007/BF01833292).
- Curnier, A. und P. Alart [1988]. „A generalized Newton method for contact problems with friction“. In: *J. de Mécanique Théorique et Appliquée* 7, S. 67–82. URL: http://www.researchgate.net/publication/37422172_Generalized_Newton_method_for_contact_problems_with_friction.
- Cyrus, M. und J. Beck [1978]. „Generalized two- and three-dimensional clipping“. In: *Computers and Graphics* 3.1, S. 23–28. DOI: [10.1016/0097-8493\(78\)90021-3](https://doi.org/10.1016/0097-8493(78)90021-3).
- Dahlquist, G. G. [1963]. „A special stability problem for linear multistep methods“. In: *BIT* 3.1, S. 27–43. DOI: [10.1007/BF01963532](https://doi.org/10.1007/BF01963532).
- De Boer, R. [1982]. *Vektor- und Tensorrechnung für Ingenieure*. Berlin: Springer Verlag.
- De Lorenzis, L., Í. Temizer, P. Wriggers und G. Zavarise [2011]. „A large deformation frictional contact formulation using NURBS-based isogeometric analysis“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 87, S. 1278–1300. DOI: [10.1002/nme.3159](https://doi.org/10.1002/nme.3159).
- De Lorenzis, L., P. Wriggers und G. Zavarise [2012]. „A mortar formulation for 3D large deformation contact using NURBS-based isogeometric analysis and the augmented Lagrangian method“. In: *Computational Mechanics* 49.1, S. 1–20. DOI: [10.1007/s00466-011-0623-4](https://doi.org/10.1007/s00466-011-0623-4).
- De Lorenzis, L., P. Wriggers und T. J. R. Hughes [2014]. „Isogeometric contact: a review“. In: *GAMM-Mitteilungen* 37.1, S. 85–123. DOI: [10.1002/gamm.201410005](https://doi.org/10.1002/gamm.201410005).
- Dekker, K. und J. Verwer [1984]. *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*. Amsterdam: North-Holland. URL: <https://books.google.de/books?id=a5z1YQEACAAJ>.
- Dettmer, W. und D. Perić [2003]. „An analysis of the time integration algorithms for the finite element solutions of incompressible Navier–Stokes equations based on a stabilised formulation“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 192.9-10, S. 1177–1226. DOI: [10.1016/S0045-7825\(02\)00603-5](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(02)00603-5).
- Deuffhard, P. und F. A. Bornemann [2008]. *Numerische Mathematik II: Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Berlin: de Gruyter.
- Dhatt, G., G. Touzot und E. Lefrançois [2012]. *Finite Element Method*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc. DOI: [10.1002/9781118569764](https://doi.org/10.1002/9781118569764).
- Diebels, S., P. Ellsiepen und W. Ehlers [1999]. „Error-controlled Runge-Kutta Time Integration of a Viscoplastic Hybrid Two-phases Model“. In: *Technische Mechanik* 19, S. 19–27. URL: http://www.uni-magdeburg.de/ifme/zeitschrift_tm/1999_Heft1/Diebels.pdf.
- Dimitri, R., L. De Lorenzis, M. A. Scott, P. Wriggers, R. L. Taylor und G. Zavarise [2014]. „Isogeometric large deformation frictionless contact using T-splines“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 269, S. 394–414. DOI: [10.1016/j.cma.2013.11.002](https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.11.002).

-
- Dittmann, M., M. Franke, I. Temizer und C. Hesch [2014]. „Isogeometric Analysis and thermomechanical Mortar contact problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 274, S. 192–212. DOI: [10.1016/j.cma.2014.02.012](https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.02.012).
- Doll, S. und K. Schweizerhof [2000]. „On the Development of Volumetric Strain Energy Functions“. In: *Journal of Applied Mechanics* 67.1, S. 17. DOI: [10.1115/1.321146](https://doi.org/10.1115/1.321146).
- Doltsinis, I. S. [1990]. „Aspects of modelling and computation in the analysis of metal forming“. In: *Engineering Computations* 7.1, S. 2–20. DOI: [10.1108/eb023789](https://doi.org/10.1108/eb023789).
- Drouot, G. und P. Hild [2015]. „Optimal Convergence for Discrete Variational Inequalities Modelling Signorini Contact in 2D and 3D without Additional Assumptions on the Unknown Contact Set“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 53.3, S. 1488–1507. DOI: [10.1137/140980697](https://doi.org/10.1137/140980697).
- Düster, A. [2001]. „High order finite elements for three-dimensional, thin-walled nonlinear continua“. Diss. Lehrstuhl für Bauinformatik, Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen, Technische Universität München.
- Düster, A., H. Bröker und E. Rank [2001]. „The p-version of the finite element method for three-dimensional curved thin walled structures“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 52.7, S. 673–703. DOI: [10.1002/nme.222](https://doi.org/10.1002/nme.222).
- Düster, A., A. Niggel, V. Nübel und E. Rank [2002]. „A Numerical Investigation of High-Order Finite Elements for Problems of Elastoplasticity“. In: *Journal of Scientific Computing* 17 [1-4]. DOI: [10.1023/a:1015189706770](https://doi.org/10.1023/a:1015189706770).
- Düster, A. und E. Rank [2001]. „The p-version of the finite element method compared to an adaptive h-version for the deformation theory of plasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190.15-17, S. 1925–1935. DOI: [10.1016/S0045-7825\(00\)00215-2](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(00)00215-2).
- Düster, A. und E. Rank [2002]. „A p-version finite element approach for two- and three-dimensional problems of the J_2 flow theory with non-linear isotropic hardening“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 53.1, S. 49–63. DOI: [10.1002/nme.391](https://doi.org/10.1002/nme.391).
- Düster, A., D. Scholz und E. Rank [2007]. „pq-Adaptive solid finite elements for three-dimensional plates and shells“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.1-4, S. 243–254. DOI: [10.1016/j.cma.2007.07.020](https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.07.020).
- Düster, A., S. Hartmann und E. Rank [2003]. „p-FEM applied to finite isotropic hyperelastic bodies“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 192.47-48, S. 5147–5166. DOI: [10.1016/j.cma.2003.07.003](https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.07.003).
- Duvanenko, V. J., R. S. Gyurcsik und W. E. Robbins [1993]. „Simple and efficient 2D and 3D span clipping algorithms“. In: *Computers and Graphics* 17.1, S. 39–54. DOI: [10.1016/0097-8493\(93\)90050-J](https://doi.org/10.1016/0097-8493(93)90050-J).
- Eckert, S., H. Baaser, D. Gross und O. Scherf [2004]. „A BDF2 integration method with step size control for elasto-plasticity“. In: *Computational Mechanics* 34.5, S. 377–386. DOI: [10.1007/s00466-004-0581-1](https://doi.org/10.1007/s00466-004-0581-1).
- Ehlers, W. und G. Eipper [1998]. „The simple tension problem at large volumetric strains computed from finite hyperelastic material laws“. In: *Acta Mechanica* 130.1-2, S. 17–27. DOI: [10.1007/BF01187040](https://doi.org/10.1007/BF01187040).

- Ehlers, W. und P. Ellsiepen [1998]. „Adaptive Zeitintegration-Verfahren für ein elastisch-viskoplastisches Zweiphasenmodell“. In: *ZAMM Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 78, S361–S362.
- Ehlers, W. [1993]. „Constitutive Equations for Granular Materials in Geomechanical Context“. In: *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*. Hrsg. von C. Hutter. CISM Courses and Lectures No.337. Vienna: Springer Vienna, S. 313–402. DOI: [10.1007/978-3-7091-2600-4_4](https://doi.org/10.1007/978-3-7091-2600-4_4).
- Eidel, B. und C. Kuhn [2011]. „Order reduction in computational inelasticity: Why it happens and how to overcome it-The ODE-case of viscoelasticity“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 87.11, S. 1046–1073. DOI: [10.1002/nme.3144](https://doi.org/10.1002/nme.3144).
- Eidel, B., F. Stumpf und J. Schröder [2013]. „Finite strain viscoelasticity: how to consistently couple discretizations in time and space on quadrature-point level for full order $p \geq 2$ and a considerable speed-up“. In: *Computational Mechanics* 52.3, S. 463–483. DOI: [10.1007/s00466-012-0823-6](https://doi.org/10.1007/s00466-012-0823-6).
- Ellsiepen, P. [1999]. „Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien“. Report No. II-3. Doctoral Thesis. Institute of Mechanics II, University of Stuttgart.
- Ellsiepen, P. und S. Hartmann [2001]. „Remarks on the Interpretation of Current Non-linear Finite-Element-Analyses as Differential-Algebraic Equations“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 51.6, S. 679–707. URL: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/nme.179>.
- Engeln-Müllges, G. und F. Reutter [1986]. *Numerische Mathematik in Standard FORTRAN 77 Programmen*. 5th. Mannheim: BI-Wissenschaftsverlag.
- Erbts, P., S. Rothe, A. Düster und S. Hartmann [2012]. „Coupling Algorithms for Small Strain Thermo-Viscoplasticity: Monolithic vs. Partitioned Approach“. In: *Proceedings of the 1st International Conference on Thermo-Mechanically Graded Materials*. Hrsg. von H.-P. Heim, D. Biermann und J. Maier. Verlag Wissenschaftliche Scripten, Auerbach, S. 81–86. URL: <http://www.cie.bv.tum.de/~zander/fastpublish/html/public/papers/A15ErbtsKassel.pdf>.
- Erbts, P. und A. Düster [2012]. „Accelerated staggered coupling schemes for problems of thermoelasticity at finite strains“. In: *Computers and Mathematics with Applications* 64.8, S. 2408–2430. DOI: [10.1016/j.camwa.2012.05.010](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2012.05.010).
- Erbts, P., S. Hartmann und A. Düster [2015]. „A partitioned solution approach for electro-thermo-mechanical problems“. In: *Archive of Applied Mechanics* 85.8, S. 1075–1101. DOI: [10.1007/s00419-014-0941-z](https://doi.org/10.1007/s00419-014-0941-z).
- Erbts, P., S. Rothe, A. Düster und S. Hartmann [2013]. „Energy-Conserving Data Transfer in the Partitioned Treatment of Thermo-Viscoplastic Problems“. In: *PAMM* 13.1, S. 211–212. DOI: [10.1002/pamm.201310101](https://doi.org/10.1002/pamm.201310101).
- Erhart, T., W.A. Wall und E. Ramm [2006]. „Robust adaptive remeshing strategy for large deformation, transient impact simulations“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 65.13, S. 2139–2166. DOI: [10.1002/nme.1531](https://doi.org/10.1002/nme.1531).
- Erlicher, S., L. Bonaventura und O.S. Bursi [2002]. „The analysis of the Generalized- α method for non-linear dynamic problems“. In: *Computational Mechanics* 28.2, S. 83–104. DOI: [10.1007/s00466-001-0273-z](https://doi.org/10.1007/s00466-001-0273-z).

-
- Fairweather, G. [1978]. *Finite element Galerkin methods for differential equations*. Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics. New York: Dekker, M.
- Farah, P., A. Popp und W. Wall [2015]. „Segment-based vs. element-based integration for mortar methods in computational contact mechanics“. In: *Computational Mechanics* 55.1, S. 209–228. DOI: [10.1007/s00466-014-1093-2](https://doi.org/10.1007/s00466-014-1093-2).
- Farah, P., W. A. Wall und A. Popp [2017]. „An implicit finite wear contact formulation based on dual mortar methods“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 111.4, S. 325–353. DOI: [10.1002/nme.5464](https://doi.org/10.1002/nme.5464).
- Felippa, C. A. [1966]. „Refined Finite Element Analysis of Linear and Nonlinear Two-dimensional Structures“. PhD-thesis, Report (University of California, Berkeley. Structural Engineering Laboratory). University of California, Berkeley. URL: <https://books.google.de/books?id=NsxgtQAACAAJ>.
- Felippa, C. A. [2004]. *A Compendium of FEM Integration Rules for CAS Work*. Techn. Ber. University of Colorado.
- Felippa, C. A. und K. C. Park [1980]. „Staggered transient analysis procedures for coupled mechanical systems: Formulation“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 24.1, S. 61–111. DOI: [10.1016/0045-7825\(80\)90040-7](https://doi.org/10.1016/0045-7825(80)90040-7).
- Felippa, C. A., K. C. Park und C. Farhat [2001]. „Partitioned analysis of coupled mechanical systems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190.24-25, S. 3247–3270. DOI: [10.1016/S0045-7825\(00\)00391-1](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(00)00391-1).
- Fischer, K. A. und P. Wriggers [2005]. „Frictionless 2D Contact formulations for finite deformations based on the mortar method“. In: *Computational Mechanics* 36.3, S. 226–244. DOI: [10.1007/s00466-005-0660-y](https://doi.org/10.1007/s00466-005-0660-y).
- Fischer, K. A. und P. Wriggers [2006]. „Mortar based frictional contact formulation for higher order interpolations using the moving friction cone“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195.37-40, S. 5020–5036. DOI: [10.1016/j.cma.2005.09.025](https://doi.org/10.1016/j.cma.2005.09.025).
- Fish, J. und K. Shek [1999]. „Computational aspects of incrementally objective algorithms for large deformation plasticity“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 44.6, S. 839–851. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990228\)44:6<839::AID-NME533>3.0.CO;2-C](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19990228)44:6<839::AID-NME533>3.0.CO;2-C).
- Flemisch, B. und B. I. Wohlmuth [2007]. „Stable Lagrange multipliers for quadrilateral meshes of curved interfaces in 3D“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 196.8, S. 1589–1602. DOI: [10.1016/j.cma.2006.03.022](https://doi.org/10.1016/j.cma.2006.03.022).
- Flory, P. J. [1961]. „Thermodynamic relations for high elastic materials“. In: *Transaction of the Faraday Society* 57, S. 829–838.
- Foley, J. D., A. van Dam, S. K. Feiner und J. F. Hughes [1995]. *Computer Graphics: Principles and Practice in C*. 2. Aufl. Addison-Wesley.
- Francavilla, A. und O. C. Zienkiewicz [1975]. „A note on numerical computation of elastic contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 9.4, S. 913–924. DOI: [10.1002/nme.1620090410](https://doi.org/10.1002/nme.1620090410).
- Franke, M. [2014]. „Discretisation techniques for large deformation computational contact elastodynamics“. Schriftenreihe des Instituts für Mechanik, Band 1. Karlsruher Institut für Technologie.

- Fried, I. und D. S. Malkus [1975]. „Finite element mass matrix lumping by numerical integration with no convergence rate loss“. In: *International Journal of Solids and Structures* 11.4, S. 461–466. DOI: [10.1016/0020-7683\(75\)90081-5](https://doi.org/10.1016/0020-7683(75)90081-5).
- Fritsch, A. [2004]. „Finite Thermoplastizität Materialmodellierung und Numerik thermoplastischer Werkstoffe bei finiten Deformationen“. Diss. Institut für Mechanik der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik der Universität der Bundeswehr München.
- Fritzen, P. [1997]. „Numerische Behandlung nichtlinearer Probleme der Elastizitäts- und Plastizitätstheorie“. Diss. Universität Darmstadt.
- Gabbert, U. [1987]. „Die Finite-Element-Methode in den Ingenieurwissenschaften unter dem Aspekt der rechentechnischen Realisierung im Rahmen universeller Programmsysteme“. Diss. TU Magdeburg.
- Galvanetto, U. und M. A. Crisfield [1996]. „An energy-conserving co-rotational procedure for the dynamics of planar beam structures“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 39.13, S. 2265–2282. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19960715\)39:13<2265::AID-NME954>3.0.CO;2-0](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19960715)39:13<2265::AID-NME954>3.0.CO;2-0).
- Gear, C. W. [1986]. „Maintaining Solution Invariants in the Numerical Solution of ODEs“. In: *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 7.3, S. 734–743. DOI: [10.1137/0907050](https://doi.org/10.1137/0907050).
- Gerlach, S. [2003]. „Modellbildung und Parameteridentifikation viskoelastischer Faserverbundwerkstoffe“. Bericht 2/2003. Universität Kassel.
- Gitterle, M. [2012]. „A dual mortar formulation for finite deformation frictional contact problems including wear and thermal coupling“. Diss. München: Lehrstuhl für Numerische Mechanik, Technische Universität München.
- Gitterle, M., A. Popp, M. W. Gee und W. A. Wall [2010]. „Finite deformation frictional mortar contact using a semi-smooth Newton method with consistent linearization“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 84.5, S. 543–571. DOI: [10.1002/nme.2907](https://doi.org/10.1002/nme.2907).
- Glaser, S. [1991]. „Berechnung gekoppelter thermomechanischer Prozesse“. Diss. Stuttgart (Germany): Institut für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrtkonstruktionen, Universität Stuttgart.
- Gleim, T., B. Schröder und D. Kuhl [2015]. „Nonlinear thermo-electromagnetic analysis of inductive heating processes“. In: *Archive of Applied Mechanics* 85.8, S. 1055–1073. DOI: [10.1007/s00419-014-0968-1](https://doi.org/10.1007/s00419-014-0968-1).
- Gonzalez-Ferreiro, B., H. Gomez und I. Romero [2014]. „A thermodynamically consistent numerical method for a phase field model of solidification“. In: *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 19.7, S. 2309–2323. DOI: [10.1016/j.cnsns.2013.11.016](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2013.11.016).
- Gonzalez, O. [1996]. „Design and analysis of conserving integrators for nonlinear Hamiltonian systems with symmetry“. Diss. Department of Mechanical Engineering, Division of Applied Mechanics, Stanford: Stanford University.
- Gonzalez, O. [2000]. „Exact energy and momentum conserving algorithms for general models in nonlinear elasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190.13-14, S. 1763–1783. DOI: [10.1016/S0045-7825\(00\)00189-4](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(00)00189-4).

-
- Gordon, W. und C. Hall [1973a]. „Construction of curvilinear co-ordinate systems and applications to mesh generation“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 7, S. 461–477.
- Gordon, W. und C. Hall [1973b]. „Transfinite Element Methods: Blending-Function Interpolation over Arbitrary Curved Element Domains“. In: *Numerische Mathematik* 21, S. 109–129.
- Goudreau, G. L. und R. L. Taylor [1973]. „Evaluation of numerical integration methods in elastodynamics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2.1, S. 69–97. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(73\)90023-6](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(73)90023-6).
- Govindjee, S. und S. Reese [1997]. „A Presentation and Comparison of Two Large Deformation Viscoelasticity Models“. In: *ASME Journal of Engineering Materials and Technology* 199, S. 251–255.
- Grafenhorst, M., S. Hartmann und J. Rang [2014]. „Second-order time-integration in inelastic dynamical systems“. In: *PAMM* 14.1, S. 217–218. DOI: [10.1002/pamm.201410096](https://doi.org/10.1002/pamm.201410096).
- Grafenhorst, M., S. Hartmann und J. Rang [2016]. „Time-adaptive non-linear finite-element computations for thermo-mechanically coupled analysis in inelastic dynamical systems“. In: *PAMM* 16.1, S. 443–444. DOI: [10.1002/pamm.201610210](https://doi.org/10.1002/pamm.201610210).
- Grafenhorst, M., J. Rang und S. Hartmann [2017]. „Time-adaptive finite element simulations of dynamical problems for temperature-dependent materials“. In: *Journal of Mechanics of Materials and Structures* 12.1, S. 57–91. DOI: [10.2140/jomms.2017.12.57](https://doi.org/10.2140/jomms.2017.12.57).
- Greenberg, M. [1998]. *Advanced Engineering Mathematics*. New Jersey: Prentice Hall.
- Grmela, M. und H. C. Öttinger [1997]. „Dynamics and thermodynamics of complex fluids. I. Development of a general formalism“. In: *Physical Review E* 56.6, S. 6620–6632. DOI: [10.1103/PhysRevE.56.6620](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.56.6620).
- Gross, D., W. Hauger und P. Wriggers [2014]. *Technische Mechanik 4*. Springer-Lehrbuch. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. DOI: [10.1007/978-3-642-41000-0](https://doi.org/10.1007/978-3-642-41000-0).
- Groß, M. [2004]. „Conserving Time Integrators for Nonlinear Elastodynamics“. Diss. Technische Universität Kaiserslautern.
- Groß, M. und P. Betsch [2009]. „Energy-momentum consistent finite element discretization of dynamic finite viscoelasticity“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, S. 1341–1386. DOI: [10.1002/nme.2729](https://doi.org/10.1002/nme.2729).
- Groß, M. und P. Betsch [2011]. „Galerkin-based energy-momentum consistent time-stepping algorithms for classical nonlinear thermo-elastodynamics“. In: *Mathematics and Computers in Simulation* 82.4, S. 718–770. DOI: [10.1016/j.matcom.2011.10.009](https://doi.org/10.1016/j.matcom.2011.10.009).
- Großmann, C. und H. Roos [1994]. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Stuttgart: Teubner Verlag.
- Gustafsson, K. [1991]. „Control Theoretic Techniques for Stepsize Selection in Explicit Runge-Kutta Methods“. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 17.4, S. 533–554. DOI: [10.1145/210232.210242](https://doi.org/10.1145/210232.210242).
- Gustafsson, K. [1992]. „Control of error and convergence in ODE solvers“. Diss. Lund University. URL: https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig%7B%5C_%7Dq=RN:24008017.

- Gustafsson, K. [1994]. „Control-theoretic Techniques for Step-size Selection in Implicit Runge-Kutta Methods“. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 20.4, S. 496–517. DOI: [10.1145/198429.198437](https://doi.org/10.1145/198429.198437).
- Gustafsson, K., M. Lundh und G. Söderlind [1988]. „A PI step-size control for the numerical solution of ordinary differential equations“. In: *BIT Numerical Mathematics* 28.2, S. 270–287. DOI: [10.1007/BF01934091](https://doi.org/10.1007/BF01934091).
- Hager, C., S. Hieber und B. I. Wohlmuth [2008]. „A stable energy-conserving approach for frictional contact problems based on quadrature formulas“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 73.2, S. 205–225. DOI: [10.1002/nme.2069](https://doi.org/10.1002/nme.2069).
- Hairer, E., C. Lubich und M. Roche [1988]. „Error of Runge-Kutta methods for stiff problems studied via differential algebraic equations“. In: *BIT Numerical Mathematics* 28, S. 678–700.
- Hairer, E., C. Lubich und M. Roche [1989]. *The numerical solution of differential-algebraic systems by Runge-Kutta methods*. Lecture Notes in Mathematics. Berlin: Springer-Verlag.
- Hairer, E., C. Lubich und G. Wanner [2002]. *Geometric Numerical Integration*. Berlin: Springer.
- Hairer, E., C. Lubich und G. Wanner [2006]. *Geometric Numerical Integration*. 2nd. Bd. 31. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag. DOI: [10.1007/3-540-30666-8](https://doi.org/10.1007/3-540-30666-8).
- Hairer, E., S. Norsett und G. Wanner [1993]. *Solving Ordinary Differential Equations I*. 2nd Revised. Berlin: Springer.
- Hairer, E. und G. Wanner [1996]. *Solving Ordinary Differential Equations II*. 2nd Revised. Berlin: Springer.
- Hallquist, J. O. [1979]. *NIKE2D: an implicit, finite-deformation, finite-element code for analyzing the static and dynamic response of two-dimensional solids*. Technical Report UCRL-52678. University of California, Lawrence Livermore National Laboratory.
- Hallquist, J. O., G. L. Goudreau und D. J. Benson [1985]. „Sliding interfaces with contact-impact in large-scale Lagrangian computations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 51.1-3, S. 107–137. DOI: [10.1016/0045-7825\(85\)90030-1](https://doi.org/10.1016/0045-7825(85)90030-1).
- Hamkar, A.-W. [2013]. „Eine iterationsfreie Finite-Elemente-Methode im Rahmen der finiten Thermoviskoelastizität“. PhD-thesis, Report No. 1/2013. Clausthal-Zellerfeld: Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology.
- Hamkar, A.-W. und S. Hartmann [2008]. „Application of Rosenbrock-type methods to a constitutive model of polymeric material“. In: *PAMM* 7.1, S. 4060045–4060046. DOI: [10.1002/pamm.200700717](https://doi.org/10.1002/pamm.200700717).
- Hamkar, A.-W. und S. Hartmann [2012]. „Theoretical and numerical aspects in weak-compressible finite strain thermo-elasticity“. In: *Journal of Theoretical and Applied Mechanics* 50.1, S. 3–22. URL: http://www.researchgate.net/publication/267958455_Theoretical_and_numerical_aspects_in_weak-compressible_finite_strain_thermo-elasticity.
- Hamkar, A.-W., S. Hartmann und J. Rang [2012]. „A stiffly accurate Rosenbrock-type method of order 2 applied to FE-analyses in finite strain viscoelasticity“. In: *Applied Numerical Mathematics* 62.12, S. 1837–1848. DOI: [10.1016/j.apnum.2012.08.001](https://doi.org/10.1016/j.apnum.2012.08.001).

-
- Hammer, M. E. [2012]. „Frictional mortar contact for finite deformation problems with synthetic contact kinematics“. Diss. Graz: Institut für Festigkeitslehre, Technische Universität Graz.
- Hammer, M. E. [2013]. „Frictional mortar contact for finite deformation problems with synthetic contact kinematics“. In: *Computational Mechanics* 51.6, S. 975–998. DOI: [10.1007/s00466-012-0780-0](https://doi.org/10.1007/s00466-012-0780-0).
- Hammer, P. C., O. J. Marlowe und A. H. Stroud [1956]. „Numerical integration over simplexes and cones“. In: *Mathematics of Computation* 10.55, S. 130–137. DOI: [10.1090/S0025-5718-1956-0086389-6](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1956-0086389-6).
- Hammer, P. C. und A. H. Stroud [1958]. „Numerical evaluation of multiple Integrals II“. In: *Mathematical Tables and Other Aids to Computation* 12, S. 272–280.
- Hansbo, A. und P. Hansbo [2002]. „An unfitted finite element method, based on Nitsche’s method, for elliptic interface problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 191.47-48, S. 5537–5552. DOI: [10.1016/S0045-7825\(02\)00524-8](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(02)00524-8).
- Hansbo, A. und P. Hansbo [2004]. „A finite element method for the simulation of strong and weak discontinuities in solid mechanics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193.33-35, S. 3523–3540. DOI: [10.1016/j.cma.2003.12.041](https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.041).
- Hansbo, P. [2005]. „Nitsche’s method for interface problems in computational mechanics“. In: *GAMM-Mitteilungen* 28.2, S. 183–206. DOI: [10.1002/gamm.201490018](https://doi.org/10.1002/gamm.201490018).
- Hartmann, S. [2000]. „A Time Adaptiv Finite-Element Procedure Applied to Creep and Relaxation Processes“. In: *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 80.S2, S. 515–516. DOI: [10.1002/zamm.200008014128](https://doi.org/10.1002/zamm.200008014128).
- Hartmann, S. [1993]. „Lösung von Randwertaufgaben der Elastoplastizität Ein Finite-Elemente-Konzept für nichtlineare kinematische Verfestigungen bei kleinen und finiten Verzerrungen“. PhD-thesis, Bericht 1/1993. Universität Kassel. URL: <http://kobra.bibliothek.uni-kassel.de/bitstream/urn:nbn:de:hebis:34-2007060618576/3/DissertationStefanHartmann.pdf>.
- Hartmann, S. [1998]. „Nichtlineare Finite-Elemente-Berechnung angewendet auf ein Visko-plastizitätsmodell mit Überspannungen“. In: *Aspekte der Kontinuumsmechanik und Materialtheorie*. Hrsg. von S. Hartmann und C. Tsakmakis. Kassel: Gesamthochschul-Bibliothek Verlag, S. 55–80.
- Hartmann, S. [1999]. „A Time-Adaptive FE-Analysis of Inelastic Structures“. In: *ECCM ’99 European Conference on Computational Mechanics*. Hrsg. von W. Wunderlich. ECCM. Munich.
- Hartmann, S. [2001a]. „Finite-Element Computation of Large Strain Viscoelastic Structures using Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods“. In: *European Conference on Computational Mechanics 2001*. ECCM. Cracow.
- Hartmann, S. [2002]. „Computation in finite-strain viscoelasticity: finite elements based on the interpretation as differential-algebraic equations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 191.13-14, S. 1439–1470. DOI: [10.1016/S0045-7825\(01\)00332-2](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(01)00332-2).
- Hartmann, S. [2003]. „Finite-Elemente-Berechnung inelastischer Kontinua: Interpretation als Algebro-Differentialgleichungssysteme“. Report No. 1/2003. Habilitation.

- University of Kassel, Institute of Mechanics. URL: http://www.researchgate.net/publication/34201531_Finite-Elemente-Berechnung_inelastischer_Kontinua_Interpretation_als_Algebro-Differentialgleichungssysteme.
- Hartmann, S. [2005]. „A remark on the application of the Newton-Raphson method in non-linear finite element analysis“. In: *Computational Mechanics* 36.2, S. 100–116. DOI: [10.1007/s00466-004-0630-9](https://doi.org/10.1007/s00466-004-0630-9).
- Hartmann, S. [2006a]. *TASA-FEM: Ein Finite-Elemente Programm für raum-zeitadaptive gekoppelte Strukturberechnungen, Version 1.0*. Mitteilung des Instituts für Mechanik 1. Institut für Mechanik, Universität Kassel.
- Hartmann, S. und W. Bier [2008]. „High-order time integration applied to metal powder plasticity“. In: *International Journal of Plasticity* 24.1, S. 17–54. DOI: [10.1016/j.ijplas.2007.01.014](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2007.01.014).
- Hartmann, S., S. Brunssen, E. Ramm und B. Wohlmuth [2007]. „Unilateral non-linear dynamic contact of thin-walled structures using a primal-dual active set strategy“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 70.8, S. 883–912. DOI: [10.1002/nme.1894](https://doi.org/10.1002/nme.1894).
- Hartmann, S., J. Duintjer Tebbens, K. J. J. Quint und A. Meister [2009a]. „Iterative solvers within sequences of large linear systems in non-linear structural mechanics“. In: *ZAMM* 89.9, S. 711–728. DOI: [10.1002/zamm.200800211](https://doi.org/10.1002/zamm.200800211).
- Hartmann, S. und A.-W. Hamkar [2010]. „Rosenbrock-type methods applied to finite element computations within finite strain viscoelasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.23-24, S. 1455–1470. DOI: [10.1016/j.cma.2009.12.011](https://doi.org/10.1016/j.cma.2009.12.011).
- Hartmann, S., A. Lion und P. Haupt [1997a]. „Beschreibung der Kriecheigenschaften von Beton durch rheologische Modelle mit fraktioneller Ordnung“. In: *Materialmodelle und Methoden zur wirklichkeitsnahen Berechnung von Beton-, Stahlbeton- und Spannbetonbauteilen*. Hrsg. von F. Blaschke, G. Günther und J. Kollegger. Kassel: Gesamthochschul-Bibliothek Verlag, S. 104–111.
- Hartmann, S., G. Lührs und P. Haupt [1997b]. „An efficient stress algorithm with applications in viscoplasticity and plasticity“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 40.6, S. 991–1013. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19970330\)40:6<991::AID-NME98>3.0.CO;2-H](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19970330)40:6<991::AID-NME98>3.0.CO;2-H).
- Hartmann, S., K. J. Quint und M. Arnold [2008a]. „On Plastic Incompressibility within Time-Adaptive Finite Elements Combined with Projection Techniques“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.2, S. 178–193. DOI: [10.1016/j.cma.2008.06.011](https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.06.011).
- Hartmann, S., K. J. Quint und A.-W. Hamkar [2008b]. „Displacement Control in Time-Adaptive Non-Linear Finite-Element Analysis“. In: *Journal of Applied Mathematics and Mechanics* 88.5, S. 342–364. DOI: [10.1002/zamm.200800002](https://doi.org/10.1002/zamm.200800002).
- Hartmann, S. und E. Ramm [2008]. „A mortar based contact formulation for non-linear dynamics using dual Lagrange multipliers“. In: *Finite Elements in Analysis and Design* 44.5, S. 245–258. DOI: [10.1016/j.finel.2007.11.018](https://doi.org/10.1016/j.finel.2007.11.018).
- Hartmann, S., S. Rothe und N. Frage [2013]. „Electro-Thermo-Elastic Simulation of Graphite Tools Used in SPS Processes“. In: *Generalized Continua as Models of Materials*. Hrsg. von H. Altenbach, S. Forest und A. Krivtsov. Bd. 22. Advanced

-
- Structured Materials. Berlin: Springer, S. 143–161. DOI: [10.1007/978-3-642-36394-8_8](https://doi.org/10.1007/978-3-642-36394-8_8).
- Hartmann, S., D. Kuhl und K. J. Quint [2009b]. „Time-adaptive computation of finite strain thermoviscoplastic structures“. In: *Functionally Graded Materials in Industrial Mass Production*. Hrsg. von K. Steinhoff, H. J. Maier und D. Biermann. Auerbach (Germany): Verlag Wissenschaftliche Scripten, Auerbach. Kap. 4.1, S. 269–282. URL: http://www.researchgate.net/publication/279193629_Time-Adaptive_Computation_of_Finite_Strain_Thermoviscoplastic_Structures.
- Hartmann, S., A. Meister, P. Birken und K. J. Quint [2009c]. „Thermal Fluid-Structure-Interaction of Cooling Processes in Steel Forming“. In: *Functionally Graded Materials in Industrial Mass Production*. Hrsg. von K. Steinhoff, K.-J. Maier und B. Svendsen. Verlag Wissenschaftliche Scripten, Auerbach. Kap. 4.2, S. 283–292. URL: http://www.researchgate.net/publication/279193632_Thermal_Fluid-Structure-Interaction_of_cooling_processes_in_steel_forming.
- Hartmann, S. [2001b]. „Parameter estimation of hyperelasticity relations of generalized polynomial-type with constraint conditions“. In: *International Journal of Solids and Structures* 38.44-45, S. 7999–8018. DOI: [10.1016/S0020-7683\(01\)00018-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(01)00018-X).
- Hartmann, S. [2004]. „Newton- vs. Multilevel-Newton method in the FEM“. In: *PAMM* 4.1, S. 318–319. DOI: [10.1002/pamm.200410140](https://doi.org/10.1002/pamm.200410140).
- Hartmann, S. [2006b]. „A Thermomechanically Consistent Constitutive Model for Polyoxymethylene“. In: *Archive of Applied Mechanics* 76.5-6, S. 349–366. DOI: [10.1007/s00419-006-0034-8](https://doi.org/10.1007/s00419-006-0034-8).
- Hartmann, S. [2007]. „Kontaktanalyse dünnwandiger Strukturen bei großen Deformationen“. Diss. Universität Stuttgart. URL: <http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2007/3109/>.
- Hartmann, S. und W. Bier [2007]. „Modeling and computation of metal powder compaction processes“. In: *PAMM* 7.1, S. 4060043–4060044. DOI: [10.1002/pamm.200700622](https://doi.org/10.1002/pamm.200700622).
- Hartmann, S. und P. Neff [2003]. „Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility“. In: *International Journal of Solids and Structures* 40.11, S. 2767–2791. DOI: [10.1016/S0020-7683\(03\)00086-6](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00086-6).
- Hartmann, S. und T. Netz [2013]. „High-order time-integration applied to p-version finite elements within finite strain thermo-viscoelasticity“. In: *PAMM* 13.1, S. 205–206. DOI: [10.1002/pamm.201310098](https://doi.org/10.1002/pamm.201310098).
- Hartmann, S. und J. Wensch [2007]. „Finite element analysis of viscoelastic structures using Rosenbrock-type methods“. In: *Computational Mechanics* 40.2, S. 383–398. DOI: [10.1007/s00466-006-0117-y](https://doi.org/10.1007/s00466-006-0117-y).
- Haupt, P. [2002]. *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Berlin: Springer, 2nd edition.
- Haupt, P. [1996]. „Konzepte der Materialtheorie“. In: *Technische Mechanik* 16, S. 13–22. URL: http://www.uni-magdeburg.de/ifme/zeitschrift_tm/1996_Heft1/Haupt.pdf.
- Haupt, P. und K. Sedlan [2001]. „Viscoplasticity of elastomeric materials: experimental facts and constitutive modelling“. In: *Archive of Applied Mechanics (Ingenieur Archiv)* 71.2-3, S. 89–109. DOI: [10.1007/s004190000102](https://doi.org/10.1007/s004190000102).

- Haupt, P. und C. Tsakmakis [1989]. „On the Application of Dual Variables in Continuum Mechanics“. In: *Journal of Continuum Mechanics and Thermodynamics* 1, S. 165–196.
- Haupt, P. und C. Tsakmakis [1996]. „Stress Tensors associated with Deformation Tensors via Duality“. In: *Archive of Mechanics* 48, S. 347–384.
- Hauret, P. und P. Le Tallec [2007]. „A discontinuous stabilized mortar method for general 3D elastic problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 196.49-52, S. 4881–4900. DOI: [10.1016/j.cma.2007.06.014](https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.06.014).
- Healy, B. E. und R. H. Dodds [1992]. „A large strain plasticity model for implicit finite element analyses“. In: *Computational Mechanics* 9.2, S. 95–112. DOI: [10.1007/BF00370065](https://doi.org/10.1007/BF00370065).
- Heegaard, J.-H. und A. Curnier [1993]. „An augmented Lagrangian method for discrete large-slip contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 36.4, S. 569–593. DOI: [10.1002/nme.1620360403](https://doi.org/10.1002/nme.1620360403).
- Heisserer, U., S. Hartmann, A. Düster, W. Bier, Z. Yosibash und E. Rank [2008]. „p-FEM for finite deformation powder compaction“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.6-8, S. 727–740. DOI: [10.1016/j.cma.2007.09.001](https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.09.001).
- Heisserer, U., S. Hartmann, A. Düster und Z. Yosibash [2007]. „On volumetric locking-free behaviour of p-version finite elements under finite deformations“. In: *Communications in Numerical Methods in Engineering* 24.11, S. 1019–1032. DOI: [10.1002/cnm.1008](https://doi.org/10.1002/cnm.1008).
- Hellen, T. K. [1972]. „Effective Quadrature Rules for Quadratic solid Isopatametric Finite Elements“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 4, S. 597–599. DOI: [10.1002/nme.1620040414](https://doi.org/10.1002/nme.1620040414).
- Helm, D. [2003]. *Kontinuumsmechanik I, Skript zur Vorlesung des WS 2003/04 Institut für Mechanik, Universität Kassel*.
- Hertz, H. [1881]. „Über die Berührung fester elastischer Körper“. In: *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 92, S. 156–171.
- Hesch, C. und P. Betsch [2009]. „A mortar method for energy-momentum conserving schemes in frictionless dynamic contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 77.10, S. 1468–1500. DOI: [10.1002/nme.2466](https://doi.org/10.1002/nme.2466).
- Hesch, C. und P. Betsch [2010]. „Transient three-dimensional domain decomposition problems: Frame-indifferent mortar constraints and conserving integration“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 82.3, S. 329–358. DOI: [10.1002/nme.2767](https://doi.org/10.1002/nme.2767).
- Hesch, C. und P. Betsch [2011a]. „Energy-momentum consistent algorithms for dynamic thermomechanical problems-Application to mortar domain decomposition problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 86.11, S. 1277–1302. DOI: [10.1002/nme.3095](https://doi.org/10.1002/nme.3095).
- Hesch, C. und P. Betsch [2011b]. „Transient 3d contact problems—NTS method: mixed methods and conserving integration“. In: *Computational Mechanics* 48.4, S. 437–449. DOI: [10.1007/s00466-011-0597-2](https://doi.org/10.1007/s00466-011-0597-2).
- Hesch, C. und P. Betsch [2011c]. „Transient three-dimensional contact problems: mortar method. Mixed methods and conserving integration“. In: *Computational Mechanics* 48.4, S. 461–475. DOI: [10.1007/s00466-011-0583-8](https://doi.org/10.1007/s00466-011-0583-8).
- Hibbit, H. D. [1979]. „Some follower forces and load stiffness“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 14.6, S. 937–941. DOI: [10.1002/nme.1620140613](https://doi.org/10.1002/nme.1620140613).

-
- Hibbitt, H. D. und B. I. Karlsson [1979]. *Analysis of pipe whip*. Report NP-1208. EPRI.
- Hilber, H. M. [1976]. *Analysis and Design of Numerical Integration Methods in Structural Dynamics*. EERC Report No. 76-29. Berkeley: Earthquake Engineering Research Center, College of Engineering, University of California.
- Hilber, H. M. und T. J. R. Hughes [1978]. „Collocation, dissipation and [overshoot] for time integration schemes in structural dynamics“. In: *Earthquake Engineering and Structural Dynamics* 6.1, S. 99–117. DOI: [10.1002/eqe.4290060111](https://doi.org/10.1002/eqe.4290060111).
- Hilber, H. M., T. J. R. Hughes und R. L. Taylor [1977]. „Improved numerical dissipation for time integration algorithms in structural dynamics“. In: *Earthquake Engineering and Structural Dynamics* 5.3, S. 283–292. DOI: [10.1002/eqe.4290050306](https://doi.org/10.1002/eqe.4290050306).
- Hild, P. [2000]. „Numerical implementation of two nonconforming finite element methods for unilateral contact“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 184.1, S. 99–123. DOI: [10.1016/S0045-7825\(99\)00096-1](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00096-1).
- Hild, P. und P. Laborde [2002]. „Quadratic finite element methods for unilateral contact problems“. In: *Applied Numerical Mathematics* 41.3, S. 401–421. DOI: [10.1016/S0168-9274\(01\)00124-6](https://doi.org/10.1016/S0168-9274(01)00124-6).
- Hill, R. [1968]. „On constitutive inequalities for simple materials—I“. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 16.4, S. 229–242. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096\(68\)90031-8](https://dx.doi.org/10.1016/0022-5096(68)90031-8).
- Hill, R. [1970]. „Constitutive inequalities for isotropic elastic solids under finite strain“. In: *Proceedings of the Royal Society of London Series A* 314, S. 457–472.
- Hintermüller, M., K. Ito und K. Kunisch [2003]. „The Primal-Dual Active Set Strategy as a Semismooth Newton Method“. In: *SIAM Journal on Optimization* 13.3, S. 865–888. DOI: [10.1137/S1052623401383558](https://doi.org/10.1137/S1052623401383558).
- Hinton, E., T. Rock und O. C. Zienkiewicz [1976]. „A note on mass lumping and related processes in the finite element method“. In: *Earthquake Engineering and Structural Dynamics* 4.3, S. 245–249. DOI: [10.1002/eqe.4290040305](https://doi.org/10.1002/eqe.4290040305).
- Holzappel, G. A. [2000]. *Non-linear solid mechanics*. Chichester: John Wiley & Sons.
- Hoyer, W. und J. W. Schmidt [1984]. „Newton-Type Decomposition Methods for Equations Arising in Network Analysis“. In: *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 64.9, S. 397–405. DOI: [10.1002/zamm.19840640904](https://doi.org/10.1002/zamm.19840640904).
- Hüeber, S. [2008]. „Discretization Techniques and Efficient Algorithms for Contact Problems“. Bericht 2/1997. Institut für Angewandte Analysis und Numerische Simulation, Universität Stuttgart.
- Hüeber, S., M. Mair und B. I. Wohlmuth [2005]. „A priori error estimates and an inexact primal-dual active set strategy for linear and quadratic finite elements applied to multibody contact problems“. In: *Applied Numerical Mathematics* 54.3-4, S. 555–576. DOI: [10.1016/j.apnum.2004.09.019](https://doi.org/10.1016/j.apnum.2004.09.019).
- Hüeber, S., A. Matei und B. I. Wohlmuth [2007]. „Efficient Algorithms for Problems with Friction“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 29.1, S. 70–92. DOI: [10.1137/050634141](https://doi.org/10.1137/050634141).
- Hüeber, S., G. Stadler und B. I. Wohlmuth [2008]. „A Primal-Dual Active Set Algorithm for Three-Dimensional Contact Problems with Coulomb Friction“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 30.2, S. 572–596. DOI: [10.1137/060671061](https://doi.org/10.1137/060671061).

- Hüeber, S. und B. Wohlmuth [2012]. „Equilibration techniques for solving contact problems with Coulomb friction“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 205-208, S. 29–45. DOI: [10.1016/j.cma.2010.12.021](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.12.021).
- Hüeber, S. und B.I. Wohlmuth [2005]. „A primal–dual active set strategy for non-linear multibody contact problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194.27-29, S. 3147–3166. DOI: [10.1016/j.cma.2004.08.006](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.08.006).
- Hüeber, S. und B.I. Wohlmuth [2009]. „Thermo-mechanical contact problems on non-matching meshes“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.15-16, S. 1338–1350. DOI: [10.1016/j.cma.2008.11.022](https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.11.022).
- Hughes, T. J. R. [1983]. „Analysis of transient algorithms with particular reference to stability behavior“. In: *Computational Methods for Transient Analysis* 1. Hrsg. von T. Belytschko und T. J. R. Hughes, S. 67–155.
- Hughes, T. J. R. [2000]. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Dover Civil and Mechanical Engineering. Dover Publications.
- Hughes, T. J. R., T. K. Caughey und W. K. Liu [1978]. „Finite-Element Methods for Nonlinear Elastodynamics Which Conserve Energy“. In: *Journal of Applied Mechanics* 45.2. DOI: [10.1115/1.3424303](https://doi.org/10.1115/1.3424303).
- Hughes, T. J. R., J. A. Cottrell und Y. Bazilevs [2005]. „Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194.39-41, S. 4135–4195. DOI: [10.1016/j.cma.2004.10.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.10.008).
- Hughes, T. J. R., A. Reali und G. Sangalli [2010]. „Efficient quadrature for NURBS-based isogeometric analysis“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.5-8, S. 301–313. DOI: [10.1016/j.cma.2008.12.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.12.004).
- Hughes, T. J. R., R. L. Taylor und W. Kanoknukulchai [1977]. „A finite element method for large displacement contact and impact problems“. In: *Formulations and Computational Algorithms in FE Analysis*. Hrsg. von K. J. Bathe. Boston: MIT Press, S. 468–495.
- Hughes, T. J. R. [1976]. „Stability, convergence and growth and decay of energy of the average acceleration method in nonlinear structural dynamics“. In: *Computers and Structures* 6.4-5, S. 313–324. DOI: [10.1016/0045-7949\(76\)90007-9](https://doi.org/10.1016/0045-7949(76)90007-9).
- Hughes, T. J. R. [1977]. „A note on the stability of Newmark’s algorithm in nonlinear structural dynamics“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 11.2, S. 383–386. DOI: [10.1002/nme.1620110212](https://doi.org/10.1002/nme.1620110212).
- Hughes, T. J. R., R. L. Taylor, J. L. Sackman, A. Curnier und W. Kanoknukulchai [1976]. „A finite element method for a class of contact-impact problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 8.3, S. 249–276. DOI: [10.1016/0045-7825\(76\)90018-9](https://doi.org/10.1016/0045-7825(76)90018-9).
- Hughes, T. J. R. und J. Winget [1980]. „Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 15.12, S. 1862–1867. DOI: [10.1002/nme.1620151210](https://doi.org/10.1002/nme.1620151210).
- Hughes, T. J. und G. M. Hulbert [1988]. „Space-time finite element methods for elastodynamics: Formulations and error estimates“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 66.3, S. 339–363. DOI: [10.1016/0045-7825\(88\)90006-0](https://doi.org/10.1016/0045-7825(88)90006-0).

-
- Hulbert, G.M. und T. J. R. Hughes [1987]. „An error analysis of truncated starting conditions in step-by-step time integration: Consequences for structural dynamics“. In: *Earthquake Engineering and Structural Dynamics* 15.7, S. 901–910. DOI: [10.1002/eqe.4290150710](https://doi.org/10.1002/eqe.4290150710).
- Hulbert, G.M. und T. J. R. Hughes [1990]. „Space-time finite element methods for second-order hyperbolic equations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 84.3, S. 327–348. DOI: [10.1016/0045-7825\(90\)90082-W](https://doi.org/10.1016/0045-7825(90)90082-W).
- Hulbert, G. M. und I. Jang [1995]. „Automatic time step control algorithms for structural dynamics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 126.1-2, S. 155–178. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(95\)00791-X](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(95)00791-X).
- Hutter, K. und K. Jöhnk [2004]. *Continuum Methods of Physical Modeling. Continuum Mechanics, Dimensional Analysis, Turbulence*. Berlin: Springer.
- Ibrahimbegovic, A., L. Chorfi und F. Gharzeddine [2001]. „Thermomechanical coupling at finite elastic strain: covariant formulation and numerical implementation“. In: *Communications in Numerical Methods in Engineering* 17.4, S. 275–289. DOI: [10.1002/cnm.405](https://doi.org/10.1002/cnm.405).
- Irons, B.M. [1971]. „Quadrature rules for brick based finite elements“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 3, S. 293–294. DOI: [10.1002/nme.1620030213](https://doi.org/10.1002/nme.1620030213).
- Izi, R., A. Konyukhov und K. Schweizerhof [2012]. „Large penetration algorithm for 3D frictionless contact problems based on a covariant form“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 217-220, S. 186–196. DOI: [10.1016/j.cma.2012.01.012](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.01.012).
- Izi, R., A. Konyukhov und K. Schweizerhof [2013]. „3D frictionless contact problems with large load-steps based on the covariant description for higher order approximation“. In: *Engineering Structures* 50, S. 107–114. DOI: [10.1016/j.engstruct.2012.10.025](https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2012.10.025).
- Jacob, B.P. und F.N.F. Ebecken [1993]. „Adaptive time integration of nonlinear structural dynamic problems“. In: *European journal of mechanics, A/Solids* 12.2, S. 277–298.
- Jansen, K.E., C.H. Whiting und G.M. Hulbert [2000]. „A generalized- α method for integrating the filtered Navier–Stokes equations with a stabilized finite element method“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190.3-4, S. 305–319. DOI: [10.1016/S0045-7825\(00\)00203-6](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(00)00203-6).
- Jarzebski, P., K. Wisniewski und R.L. Taylor [2015]. „On parallelization of the loop over elements in FEAP“. In: *Computational Mechanics* 56.1, S. 77–86. DOI: [10.1007/s00466-015-1156-z](https://doi.org/10.1007/s00466-015-1156-z).
- Jin, S., R. R. Lewis und D. West [2005]. „A comparison of algorithms for vertex normal computation“. In: *The Visual Computer* 21.1-2, S. 71–82. DOI: [10.1007/s00371-004-0271-1](https://doi.org/10.1007/s00371-004-0271-1).
- Johnson, K.L. [1985]. *Contact Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Joosten, M. M., W. G. Dettmer und D. Peric [2009]. „Analysis of the block Gauss-Seidel solution procedure for a strongly coupled model problem with reference to fluid-structure interaction“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 78.7, S. 757–778. DOI: [10.1002/nme.2503](https://doi.org/10.1002/nme.2503).

- Jung-Ho, C. und K. Noboru [1985]. „An analysis of metal forming processes using large deformation elastic-plastic formulations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 49.1, S. 71–108. DOI: [10.1016/0045-7825\(85\)90051-9](https://doi.org/10.1016/0045-7825(85)90051-9).
- Jung, M. und U. Langer [2013]. *Methode der finiten Elemente für Ingenieure*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden. DOI: [10.1007/978-3-658-01101-7](https://doi.org/10.1007/978-3-658-01101-7).
- Juntunen, M. und R. Stenberg [2009]. „Nitsche’s method for general boundary conditions“. In: *Mathematics of Computation* 78.267, S. 1353–1374. DOI: [10.1090/S0025-5718-08-02183-2](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-08-02183-2).
- Kardelky, C. [2004]. „Dynamisches Verhalten von Elastomeren. Experimentelle Untersuchung und kontinuumsmechanische Modellierung“. Report No. 2/2004. Kassel (Germany): Forschungszentrum Karlsruhe.
- Khoei, A. R., S. O. R. Biabanaki, A. R. Vafa, I. Yadegaran und S. Keshavarz [2009]. „A new computational algorithm for contact friction modeling of large plastic deformation in powder compaction processes“. In: *International Journal of Solids and Structures* 46.2, S. 287–310. DOI: [10.1016/j.ijsolstr.2008.08.034](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2008.08.034).
- Kikuchi, N. und J. T. Oden [1988]. *Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods*. Society for Industrial und Applied Mathematics. DOI: [10.1137/1.9781611970845](https://doi.org/10.1137/1.9781611970845).
- Kim, C., R. D. Lazarov, J. E. Pasciak und P. S. Vassilevski [2001]. „Multiplier Spaces for the Mortar Finite Element Method in Three Dimensions“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 39.2, S. 519–538. DOI: [10.1137/S0036142900367065](https://doi.org/10.1137/S0036142900367065).
- Kim, J.-Y. und S.-K. Youn [2012]. „Isogeometric contact analysis using mortar method“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 89.12, S. 1559–1581. DOI: [10.1002/nme.3300](https://doi.org/10.1002/nme.3300).
- Al-Kinani, R. [2014]. „Thermo-mechanical coupling of transversely isotropic materials using high-order finite elements“. PhD-thesis, Report No. 3/2014. Clausthal-Zellerfeld: Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology.
- Al-Kinani, R., S. Hartmann und T. Netz [2015]. „Transversal isotropy based on a multiplicative decomposition of the deformation gradient within p-version finite elements“. In: *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 95.7, S. 742–761. DOI: [10.1002/zamm.201300155](https://doi.org/10.1002/zamm.201300155).
- Klein, B. [2015]. *FEM: Grundlagen und Anwendungen der Finite-Element-Methode im Maschinen- und Fahrzeugbau*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, S. 391. DOI: [10.1007/978-3-658-06054-1](https://doi.org/10.1007/978-3-658-06054-1).
- Klingbeil, E. [1966]. *Tensorrechnung für Ingenieure*. 1st. Mannheim: BI - Wissenschaftsverlag.
- Klosowski, J. T., M. Held, J. S. B. Mitchell, H. Sowizral und K. Zikan [1998]. „Efficient collision detection using bounding volume hierarchies of k-DOPs“. In: *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 4.1, S. 21–36. DOI: [10.1109/2945.675649](https://doi.org/10.1109/2945.675649).
- Knothe, K. und H. Wessels [2017]. *Finite Elemente*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. DOI: [10.1007/978-3-662-49352-6](https://doi.org/10.1007/978-3-662-49352-6).
- Konyukhov, A. und R. Izi [2015]. *Introduction to Computational Contact Mechanics: A Geometrical Approach*. Wiley Series in Computational Mechanics. Wiley. URL: <https://books.google.de/books?id=b-N2ngEACAAJ>.

-
- Konyukhov, A. und K. Schweizerhof [2006]. „A special focus on 2D formulations for contact problems using a covariant description“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 66.9, S. 1432–1465. DOI: [10.1002/nme.1604](https://doi.org/10.1002/nme.1604).
- Konyukhov, A. und K. Schweizerhof [2008]. „On the solvability of closest point projection procedures in contact analysis: Analysis and solution strategy for surfaces of arbitrary geometry“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.33-40, S. 3045–3056. DOI: [10.1016/j.cma.2008.02.009](https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.02.009).
- Konyukhov, A. und K. Schweizerhof [2010]. „Geometrically exact covariant approach for contact between curves“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.37-40, S. 2510–2531. DOI: [10.1016/j.cma.2010.04.012](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.04.012).
- Koschnick, F. [2004]. „Geometrische Locking-Effekte bei Finiten Elementen und ein allgemeines Konzept zu ihrer Vermeidung“. Diss. Lehrstuhl für Statik der Technischen Universität München.
- Krämer, S., S. Rothe, S. Hartmann, S. Kra, S. Krämer, S. Rothe und S. Hartmann [2013]. „Homogeneous stress-strain states computed by 3D-stress algorithms of FE-codes: application to material parameter identification“. In: *Engineering with Computers*, S. 1–28. DOI: [10.1007/s00366-013-0337-7](https://doi.org/10.1007/s00366-013-0337-7).
- Kreisselmeier, G. und R. Steinhauser [1979]. „Systematische Auslegung von Reglern durch Optimierung eines vektoriellen Gütekriteriums“. In: *Regelungstechnik* 3, S. 76–79.
- Krstulovic-Opara, L., P. Wriggers und J. Korelc [2002]. „A C1-continuous formulation for 3D finite deformation frictional contact“. In: *Computational Mechanics* 29.1, S. 27–42. DOI: [10.1007/s00466-002-0317-z](https://doi.org/10.1007/s00466-002-0317-z).
- Krüger, M. [2012]. „Energie-Entropie-konsistente Zeitintegratoren für die nichtlienare Thermoviskoelastodynamik“. Dissertation, Band VI. Siegen: Lehrstuhl für Numerische Mechanik, Universität Siegen.
- Krüger, M., M. Groß und P. Betsch [2011]. „A comparison of structure-preserving integrators for discrete thermoelastic systems“. In: *Computational Mechanics* 47.6, S. 701–722. DOI: [10.1007/s00466-011-0570-0](https://doi.org/10.1007/s00466-011-0570-0).
- Krüger, M., M. Groß und P. Betsch [2016]. „An energy-entropy-consistent time stepping scheme for nonlinear thermo-viscoelastic continua“. In: *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 96.2, S. 141–178. DOI: [10.1002/zamm.201300268](https://doi.org/10.1002/zamm.201300268).
- Kuhl, D. und E. Ramm [2000]. „Time integration in the context of energy control and locking free finite elements“. In: *Archives of Computational Methods in Engineering* 7.3, S. 299–332. DOI: [10.1007/BF02736211](https://doi.org/10.1007/BF02736211).
- Kuhl, D. und M. A. Crisfield [1999]. „Energy-conserving and decaying algorithms in non-linear structural dynamics“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 45, S. 569–599. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990620\)45:5<569::AID-NME595>3.0.CO;2-A](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19990620)45:5<569::AID-NME595>3.0.CO;2-A).
- Kuhl, D. [1996]. „Stabile Zeitintegrationsalgorithmen in der nichtlinearen Elastodynamik dünnwandiger Tragwerke“. Bericht-Nr. 22. Universität Stuttgart.
- Kuhl, D. und E. Ramm [1996]. „Constraint Energy Momentum Algorithm and its application to non-linear dynamics of shells“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 136.3-4, S. 293–315. DOI: [10.1016/0045-7825\(95\)00963-9](https://doi.org/10.1016/0045-7825(95)00963-9).

- Kuhl, D. und E. Ramm [1999]. „Generalized Energy-Momentum Method for non-linear adaptive shell dynamics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 178.3-4, S. 343–366. DOI: [10.1016/S0045-7825\(99\)00024-9](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00024-9).
- Kulkarni, D. V., D. A. Tortorelli und M. Wallin [2007]. „A Newton-Schur alternative to the consistent tangent approach in computational plasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 196.7, S. 1169–1177. DOI: [10.1016/j.cma.2006.06.013](https://doi.org/10.1016/j.cma.2006.06.013).
- Küttler, U. [2009]. „Effiziente Lösungsverfahren für Fluid-Struktur-Interaktions-Probleme“. Diss. München: Lehrstuhl für Numerische Mechanik, Technische Universität München.
- Lamichhane, B. P., R. P. Stevenson und B. I. Wohlmuth [2005]. „Higher order mortar finite element methods in 3D with dual lagrange multiplier bases“. In: *Numerische Mathematik* 102.1, S. 93–121. DOI: [10.1007/s00211-005-0636-z](https://doi.org/10.1007/s00211-005-0636-z).
- Lamichhane, B. P. und B. I. Wohlmuth [2002]. „Higher order dual Lagrange multiplier spaces for mortar finite element discretizations“. In: *Calcolo* 39 [4]. DOI: [10.1007/s100920200010](https://doi.org/10.1007/s100920200010).
- Lamichhane, B. P. und B. I. Wohlmuth [2007]. „Biorthogonal Bases with Local Support and Approximation Properties“. In: *Mathematics of Computation* 76.257, S. 233–249. URL: <http://www.jstor.org/stable/40234375>.
- Lang, J. [2001]. *Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems*. Bd. 16. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Berlin: Springer. DOI: [10.1007/978-3-662-04484-1](https://doi.org/10.1007/978-3-662-04484-1).
- Larsson, T. und T. Akenine-Möller [2001]. „Collision Detection for Continuously Deforming Bodies“. In: *Eurographics*, S. 325–333.
- Laursen, T. A. [1992]. „Formulation and Treatment of Frictional Contact Problems using Finite Elements“. PhD-thesis, Technical Report No. 92-6. Clausthal-Zellerfeld: Stanford University.
- Laursen, T. A. und S. Govindjee [1994]. „A note on the treatment of frictionless contact between non-smooth surfaces in fully non-linear problems“. In: *Communications in Numerical Methods in Engineering* 10.11, S. 869–878. DOI: [10.1002/cnm.1640101103](https://doi.org/10.1002/cnm.1640101103).
- Laursen, T. A. und J. C. Simo [1993a]. „A continuum-based finite element formulation for the implicit solution of multibody, large deformation-frictional contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 36.20, S. 3451–3485. DOI: [10.1002/nme.1620362005](https://doi.org/10.1002/nme.1620362005).
- Laursen, T. A. und J. C. Simo [1993b]. „Algorithmic symmetrization of coulomb frictional problems using augmented lagrangians“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 108.1-2, S. 133–146. DOI: [10.1016/0045-7825\(93\)90157-S](https://doi.org/10.1016/0045-7825(93)90157-S).
- Laursen, T. A. [2003]. *Computational Contact and Impact Mechanics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. DOI: [10.1007/978-3-662-04864-1](https://doi.org/10.1007/978-3-662-04864-1).
- Laursen, T. A., M. A. Puso und J. Sanders [2012]. „Mortar contact formulations for deformable–deformable contact: Past contributions and new extensions for enriched and embedded interface formulations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 205-208, S. 3–15. DOI: [10.1016/j.cma.2010.09.006](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.09.006).
- Lee, E. H. [1969]. „Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains“. In: *Journal of Applied Mechanics* 36, S. 1–6.

-
- Lewis, D. und J. C. Simo [1994]. „Conserving algorithms for the dynamics of Hamiltonian systems on lie groups“. In: *Journal of Nonlinear Science* 4.1, S. 253. DOI: [10.1007/BF02430634](https://doi.org/10.1007/BF02430634).
- Lewis, R. und B. Schrefler [1987]. *The finite element method in the deformation and consolidation of porous media*. Wiley series in numerical methods in engineering. Wiley.
- Li, X. D., L. F. Zeng und N.-E. Wiberg [1993]. „A simple local error estimator and an adaptive time-stepping procedure for direct integration method in dynamic analysis“. In: *Communications in Numerical Methods in Engineering* 9.4, S. 273–292. DOI: [10.1002/cnm.1640090402](https://doi.org/10.1002/cnm.1640090402).
- Liang, Y.-D. und B. A. Barsky [1984]. „A New Concept and Method for Line Clipping“. In: *ACM Transactions on Graphics* 3.1, S. 1–22. DOI: [10.1145/357332.357333](https://doi.org/10.1145/357332.357333).
- Liang, Y.-D. und B. A. Barsky [1983]. „An analysis and algorithm for polygon clipping“. In: *Communications of the ACM* 26.11, S. 868–877. DOI: [10.1145/182.358439](https://doi.org/10.1145/182.358439).
- Linhard, J. [2009]. „Numerisch-mechanische Betrachtung des Entwurfsprozesses von Membrantragwerken“. Diss. Technische Universität München.
- Lion, A. [2000a]. „Thermomechanik von Elastomeren. Experimente und Materialtheorie“. Report No. 1/2000. Habilitation. Institute of Mechanics, University of Kassel.
- Lion, A. [2000b]. „Constitutive modelling in finite thermoviscoplasticity: A physical approach based on nonlinear rheological models“. In: *International journal of plasticity* 16.5, S. 469–494. DOI: [10.1016/S0749-6419\(99\)00038-8](https://doi.org/10.1016/S0749-6419(99)00038-8).
- Lion, A. [2000c]. „Constitutive modelling in finite thermoviscoplasticity: a physical approach based on nonlinear rheological models“. In: *International Journal of Plasticity* 16.5, S. 469–494. DOI: [10.1016/S0749-6419\(99\)00038-8](https://doi.org/10.1016/S0749-6419(99)00038-8).
- Liu, C. H., G. Hofstetter und H. A. Mang [1994]. „3D Finite Element Analysis of Rubber-like Materials at Finite Strains“. In: *Engineering Computations* 11, S. 111–128.
- Lu, J. [2011]. „Isogeometric contact analysis: Geometric basis and formulation for frictionless contact“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200.5–8, S. 726–741. DOI: [10.1016/j.cma.2010.10.001](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.10.001).
- Lu, S. C. H. und K. S. Pister [1975]. „Decomposition of Deformation and Representation of the Free Energy Function for Isotropic Thermoelastic Solids“. In: *International Journal of Solids and Structures* 11.7–8, S. 927–934. DOI: [10.1016/0020-7683\(75\)90015-3](https://doi.org/10.1016/0020-7683(75)90015-3).
- Lübbing, C. [1997]. „Zur Stabilität von gestaffelten Finite-Elemente Berechnungen“. Diss. Universität Stuttgart, Stuttgart: Institut für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrtkonstruktionen, Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik.
- Lubliner, J. [1985]. „A Model of Rubber Viscoelasticity“. In: *Mechanics Research Communications* 12, S. 93–99.
- Luenberger, D. G. und Y. Ye [2008]. *Linear and Nonlinear Programming*. 3rd. International Series in Operations Research & Management Science. Springer US, S. 546. DOI: [10.1007/978-0-387-74503-9](https://doi.org/10.1007/978-0-387-74503-9).
- Lunk, C. und B. Simeon [2006]. „Solving constrained mechanical systems by the family of Newmark and α -methods“. In: *ZAMM* 86.10, S. 772–784. DOI: [10.1002/zamm.200610285](https://doi.org/10.1002/zamm.200610285).
- Marsden, J. und T. Hughes [1994]. *Mathematical Foundations of Elasticity*. Dover Civil and Mechanical Engineering Series. Dover. URL: <https://books.google.de/books?id=RjzhDL5rLSoC>.

- Martinez Page, M. A., M. Ruf und S. Hartmann [2017]. „Numerical modeling of the thickness dependence of zinc die-cast materials“. In: *Computational Mechanics*. DOI: [10.1007/s00466-017-1519-8](https://doi.org/10.1007/s00466-017-1519-8).
- Martins, J. M. P., D. M. Neto, J. L. Alves, M. C. Oliveira, H. Laurent, A. Andrade-Campos und L. F. Menezes [2017]. „A new staggered algorithm for thermomechanical coupled problems“. In: *International Journal of Solids and Structures* 122-123, S. 42–58. DOI: [10.1016/j.ijsolstr.2017.06.002](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.06.002).
- Matzen, M. E. [2015]. „Isogeometrische Modellierung und Diskretisierung von Kontaktproblemen“. Bericht Nr. 64. Institut für Baustatik und Baudynamik: Universität Stuttgart. URL: <http://dx.doi.org/10.18419/opus-642>.
- Matzen, M. E., T. Cichosz und M. Bischoff [2013]. „A point to segment contact formulation for isogeometric, NURBS based finite elements“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 255, S. 27–39. DOI: [10.1016/j.cma.2012.11.011](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.11.011).
- McDevitt, T. W. und T. A. Laursen [2000]. „A mortar-finite element formulation for frictional contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 48.10, S. 1525–1547. DOI: [10.1002/1097-0207\(20000810\)48:10<1525::AID-NME953>3.0.CO;2-Y](https://doi.org/10.1002/1097-0207(20000810)48:10<1525::AID-NME953>3.0.CO;2-Y).
- Meirovitch, L. [2001]. *Fundamentals of Vibrations*. New York: McGraw-Hill.
- Meister, A. [2015]. *Numerik linearer Gleichungssysteme*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden. DOI: [10.1007/978-3-658-07200-1](https://doi.org/10.1007/978-3-658-07200-1).
- Meyberg, K. und P. Vachenauer [2001]. *Höhere Mathematik 2: Differentialgleichungen, Funktionentheorie, Fourier-Analysis, Variationsrechnung*. 4. Aufl. Springer-Lehrbuch. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, S. 457. DOI: [10.1007/978-3-642-56655-4](https://doi.org/10.1007/978-3-642-56655-4).
- Middendorf, P. [2002]. „Viskoelastisches Verhalten von Polymersystemen“. Diss. Universität der Bundeswehr München.
- Miehe, C. [1988]. „Zur numerischen Behandlung thermodynamischer Prozesse“. Report No. F88/6. Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik der Universität Hannover.
- Miehe, C. [1993]. „Kanonische Modelle multiplikativer Elasto-Plastizität. Thermodynamische Formulierungen und numerische Implementation“. Report No. F93/1. Habilitation. Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik der Universität Hannover.
- Miehe, C. [1994]. „Aspects of the Formulation and Finite Element Implementation of Large Strain Isotropic Elasticity“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 37, S. 1981–2004.
- Miehe, C. [1995a]. „A theory of large-strain isotropic thermoplasticity based on metric transformation tensors“. In: *Archive of Applied Mechanics* 66.1-2, S. 45–64. DOI: [10.1007/BF00786688](https://doi.org/10.1007/BF00786688).
- Miehe, C. [1995b]. „Entropic thermoelasticity at finite strains. Aspects of the formulation and numerical implementation“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 120.3-4, S. 243–269. DOI: [10.1016/0045-7825\(94\)00057-T](https://doi.org/10.1016/0045-7825(94)00057-T).
- Miehe, C. und J. Schröder [2001]. „Energy and momentum conserving elastodynamics of a non-linear brick-type mixed finite shell element“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 50.8, S. 1801–1823. DOI: [10.1002/nme.95](https://doi.org/10.1002/nme.95).

-
- Mielke, A. [2011]. „Formulation of thermoelastic dissipative material behavior using GENERIC“. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 23.3, S. 233–256. DOI: [10.1007/s00161-010-0179-0](https://doi.org/10.1007/s00161-010-0179-0).
- Mlika, R., Y. Renard und F. Chouly [2017]. „An unbiased Nitsche’s formulation of large deformation frictional contact and self-contact“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 325, S. 265–288. DOI: [10.1016/j.cma.2017.07.015](https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.07.015).
- Mok, D. P. [2001]. „Partitionierte Lösungsansätze in der Strukturodynamik und der Fluid-Struktur-Interaktion“. Diss. Universität Stuttgart.
- Mooney, M. [1940]. „Theory of Large Elastic Deformation“. In: *Journal of Applied Physics* 11, S. 582–592.
- Nagtegaal, J. C. [1982]. „On the implementation of inelastic constitutive equations with special reference to large deformation problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 33.1-3, S. 469–484. DOI: [10.1016/0045-7825\(82\)90120-7](https://doi.org/10.1016/0045-7825(82)90120-7).
- Negrut, D. und O. J. Laurent [2007]. „Extensions of the HHT-method to differential-algebraic equations in mechanics.“ In: *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 26, S. 190–208. URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary;jsessionid=12CEB31C2205975181538EAE8EECA199?doi=10.1.1.157.6175>.
- Neto, D. M., M. C. Oliveira und L. F. Menezes [2017]. „Surface Smoothing Procedures in Computational Contact Mechanics“. In: *Archives of Computational Methods in Engineering* 24.1, S. 37–87. DOI: [10.1007/s11831-015-9159-7](https://doi.org/10.1007/s11831-015-9159-7).
- Netz, T. [2013]. „High-order space and time discretization scheme applied to problems of finite thermo-viscoelasticity“. PhD-thesis, Report No. 3/2013. Clausthal-Zellerfeld: Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology.
- Netz, T. und S. Hartmann [2015]. „A monolithic finite element approach using high-order schemes in time and space applied to finite strain thermo-viscoelasticity“. In: *Computers and Mathematics with Applications* 70.7, S. 1457–1480. DOI: [10.1016/j.camwa.2015.03.030](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2015.03.030).
- Netz, T., S. Hartmann und A.-W. Hamkar [2011]. „Applications of Rosenbrock-type methods to the p-version of finite elements“. In: *PAMM* 11.1, S. 255–256. DOI: [10.1002/pamm.201110119](https://doi.org/10.1002/pamm.201110119).
- Newmark, N. M. [1959]. „A Method of Computation for Structural Dynamics“. In: *Journal of the Engineering Mechanics Division* 85, S. 67–94.
- Nguyen, V. P., C. Anitescu, S. P. A. Bordas und T. Rabczuk [2015]. „Isogeometric analysis: An overview and computer implementation aspects“. In: *Mathematics and Computers in Simulation* 117, S. 89–116. DOI: [10.1016/j.matcom.2015.05.008](https://doi.org/10.1016/j.matcom.2015.05.008).
- Nicholl, T. M., D. T. Lee und R. A. Nicholl [1987]. „An efficient new algorithm for 2-D line clipping: Its development and analysis“. In: *ACM SIGGRAPH Computer Graphics* 21.4, S. 253–262. DOI: [10.1145/37402.37432](https://doi.org/10.1145/37402.37432).
- Nitsche, J. [1971]. „Über ein Variationsprinzip zur Lösung von Dirichlet-Problemen bei Verwendung von Teilräumen, die keinen Randbedingungen unterworfen sind“. In: *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg* 36.1, S. 9–15. DOI: [10.1007/BF02995904](https://doi.org/10.1007/BF02995904).
- Oancea, V. G. und T. A. Laursen [1997]. „A finite element formulation of thermomechanical rate-dependent frictional sliding“. In: *International Journal for Numerical Methods*

- in *Engineering* 40.23, S. 4275–4311. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19971215\)40:23<4275::AID-NME257>3.0.CO;2-K](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19971215)40:23<4275::AID-NME257>3.0.CO;2-K).
- Oden, J. T. [1981]. „Exterior Penalty Methods for Contact Problems in Elasticity“. In: *Nonlinear Finite Element Analysis in Structural Mechanics*. Hrsg. von W. Wunderlich, E. Stein und K. J. Bathe. Springer Berlin Heidelberg.
- Oden, J. T. [2006]. *Finite Elements of Nonlinear Continua*. New York: Dover.
- Ogden, R. W. [1972]. „Large deformation isotropic elasticity - on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids“. In: *Proceedings of the Royal Society of London Series A* 326, S. 565–584.
- Ogden, R. W. [1984]. *Non-Linear Elastic Deformations*. Chichester: Ellis Horwood.
- Ogden, R. W. [2009]. „Anisotropy and Nonlinear Elasticity in Arterial Wall Mechanics“. In: *Biomechanical Modelling at the Molecular, Cellular and Tissue Levels*. Hrsg. von G. A. Holzapfel und R. W. Ogden. Vienna: Springer Vienna, S. 179–258. DOI: [10.1007/978-3-211-95875-9_3](https://doi.org/10.1007/978-3-211-95875-9_3).
- Oliveira, M. C., J. L. Alves und L. F. Menezes [2008]. „Algorithms and Strategies for Treatment of Large Deformation Frictional Contact in the Numerical Simulation of Deep Drawing Process“. In: *Archives of Computational Methods in Engineering* 15.2, S. 113–162. DOI: [10.1007/s11831-008-9018-x](https://doi.org/10.1007/s11831-008-9018-x).
- Oñate, E. [2013]. *Structural Analysis with the Finite Element Method Linear Statics*. Lecture Notes on Numerical Methods in Engineering and Sciences. Dordrecht: Springer Netherlands. DOI: [10.1007/978-1-4020-8743-1](https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8743-1).
- Ortiz, M. und E. P. Popov [1985]. „Accuracy and stability of integration algorithms for elastoplastic constitutive relations“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 21, S. 1561–1576.
- Öttinger, H. C. [2005]. *Beyond Equilibrium Thermodynamics*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc. DOI: [10.1002/0471727903](https://doi.org/10.1002/0471727903).
- Öttinger, H. C. und M. Grmela [1997]. „Dynamics and thermodynamics of complex fluids. II. Illustrations of a general formalism“. In: *Physical Review E* 56.6, S. 6633–6655. DOI: [10.1103/PhysRevE.56.6633](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.56.6633).
- Owren, B. und H. H. Simonsen [1995]. „Alternative integration methods for problems in structural dynamics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 122.1-2, S. 1–10. DOI: [10.1016/0045-7825\(94\)00717-2](https://doi.org/10.1016/0045-7825(94)00717-2).
- Padmanabhan, V. und T. A. Laursen [2001]. „A framework for development of surface smoothing procedures in large deformation frictional contact analysis“. In: *Finite Elements in Analysis and Design* 37.3, S. 173–198. DOI: [10.1016/S0168-874X\(00\)00029-9](https://doi.org/10.1016/S0168-874X(00)00029-9).
- Papadopoulos, P. und R. L. Taylor [1993]. „A simple algorithm for three-dimensional finite element analysis of contact problems“. In: *Computers and Structures* 46.6, S. 1107–1118.
- Papadopoulos, P. und R. L. Taylor [1992]. „A mixed formulation for the finite element solution of contact problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 94.3, S. 373–389. DOI: [10.1016/0045-7825\(92\)90061-N](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90061-N).
- Parisch, H. [2003]. *Festkörper - Kontinuumsmechanik*. Stuttgart: Teubner.

-
- Park, K. C. [1975]. „An Improved Stiffly Stable Method for Direct Integration of Nonlinear Structural Dynamic Equations“. In: *Journal of Applied Mechanics* 42.2, S. 464. DOI: [10.1115/1.3423600](https://doi.org/10.1115/1.3423600).
- Park, K. C. [1980]. „Partitioned Transient Analysis Procedures for Coupled-Field Problems: Stability Analysis“. In: *Journal of Applied Mechanics* 47.2, S. 370–376. DOI: [10.1115/1.3153671](https://doi.org/10.1115/1.3153671).
- Park, K. C. und C. A. Felippa [1980]. „Partitioned Transient Analysis Procedures for Coupled-Field Problems: Accuracy Analysis“. In: *Journal of Applied Mechanics* 47.4, S. 919–926. DOI: [10.1115/1.3153814](https://doi.org/10.1115/1.3153814).
- Park, K. C. und C. A. Felippa [1983]. „Analysis of transient algorithms with particular reference to stability behavior“. In: *Computational Methods for Transient Analysis* 1. Hrsg. von T. Belytschko und T. J. R. Hughes, S. 157–220.
- Pathria, D. [1997]. „The Correct Formulation of Intermediate Boundary Conditions for Runge–Kutta Time Integration of Initial Boundary Value Problems“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 18.5, S. 1255–1266. DOI: [10.1137/S1064827594273948](https://doi.org/10.1137/S1064827594273948).
- Peano, A. [1976]. „Hierarchies of conforming finite elements for plane elasticity and plate bending“. In: *Computers and Mathematics with Applications* 2.3-4, S. 211–224. DOI: [10.1016/0898-1221\(76\)90014-6](https://doi.org/10.1016/0898-1221(76)90014-6).
- Persson, B. N. J. [2000]. *Sliding Friction*. NanoScience and Technology. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, S. 516. DOI: [10.1007/978-3-662-04283-0](https://doi.org/10.1007/978-3-662-04283-0).
- Perzyna, P. [1966]. „Fundamental problems in viscoplasticity“. In: *Advances in Applied Mechanics* 9, S. 243–377.
- Petrov, K., N. Petrov und M. Mikrenska [1994]. „A computer program for solving Signorini’s contact problem with friction“. In: *Advances in Engineering Software* 19.2, S. 97–108. DOI: [10.1016/0965-9978\(94\)90063-9](https://doi.org/10.1016/0965-9978(94)90063-9).
- Pietrzak, G. und A. Curnier [1999]. „Large deformation frictional contact mechanics: continuum formulation and augmented Lagrangian treatment“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 177.3-4, S. 351–381. DOI: [10.1016/S0045-7825\(98\)00388-0](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00388-0).
- Pinsky, P. M., M. Ortiz und K. S. Pister [1983]. „Numerical integration of rate constitutive equations in finite deformation analysis“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 40.2, S. 137–158. DOI: [10.1016/0045-7825\(83\)90087-7](https://doi.org/10.1016/0045-7825(83)90087-7).
- Pönitz, Kornelia [2006]. „Finite-Elemente-Mortaring nach einer Methode von J. A. Nitsche für elliptische Randwertaufgaben“. Diss. Technische Universität Chemnitz.
- Popov, V. L. [2009]. *Kontaktmechanik und Reibung*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, S. 328. DOI: [10.1007/978-3-540-88837-6](https://doi.org/10.1007/978-3-540-88837-6).
- Popp, A. und W. A. Wall [2014]. „Dual mortar methods for computational contact mechanics - overview and recent developments“. In: *GAMM-Mitteilungen* 37.1, S. 66–84. DOI: [10.1002/gamm.201410004](https://doi.org/10.1002/gamm.201410004).
- Popp, A., B. I. Wohlmuth, M. W. Gee und W. A. Wall [2012]. „Dual Quadratic Mortar Finite Element Methods for 3D Finite Deformation Contact“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 34.4, B421–B446. DOI: [10.1137/110848190](https://doi.org/10.1137/110848190).
- Popp, A. [2012]. „Mortar Methods for Computational Contact Mechanics and General Interface Problems“. Diss. Lehrstuhl für Numerische Mechanik, Technische Universität München.

- Popp, A., M.W. Gee und W.A. Wall [2009]. „A finite deformation mortar contact formulation using a primal-dual active set strategy“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.11, S. 1354–1391. DOI: [10.1002/nme.2614](https://doi.org/10.1002/nme.2614).
- Popp, A., M. Gitterle, M.W. Gee und W.A. Wall [2010]. „A dual mortar approach for 3D finite deformation contact with consistent linearization“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 83.11, S. 1428–1465. DOI: [10.1002/nme.2866](https://doi.org/10.1002/nme.2866).
- Popp, A., A. Seitz, M.W. Gee und W.A. Wall [2013]. „Improved robustness and consistency of 3D contact algorithms based on a dual mortar approach“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 264, S. 67–80. DOI: [10.1016/j.cma.2013.05.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.05.008).
- Prothero, A. und A. Robinson [1974]. „On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations“. In: *Mathematics of Computation* 28.125, S. 145–145. DOI: [10.1090/S0025-5718-1974-0331793-2](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1974-0331793-2).
- Puso, M. a. [2004]. „A 3D mortar method for solid mechanics“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 59.3, S. 315–336. DOI: [10.1002/nme.865](https://doi.org/10.1002/nme.865).
- Puso, M. A., T. A. Laursen und J. Solberg [2008]. „A segment-to-segment mortar contact method for quadratic elements and large deformations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.6-8, S. 555–566. DOI: [10.1016/j.cma.2007.08.009](https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.08.009).
- Puso, M. A. und T. A. Laursen [2003]. „Mesh tying on curved interfaces in 3D“. In: *Engineering Computations* 20.3, S. 305–319. DOI: [10.1108/02644400310467225](https://doi.org/10.1108/02644400310467225).
- Puso, M. A. und T. A. Laursen [2004a]. „A mortar segment-to-segment contact method for large deformation solid mechanics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193.6-8, S. 601–629. DOI: [10.1016/j.cma.2003.10.010](https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.10.010).
- Puso, M. A. und T. A. Laursen [2004b]. „A mortar segment-to-segment frictional contact method for large deformations“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193.45-47, S. 4891–4913. DOI: [10.1016/j.cma.2004.06.001](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.06.001).
- Puso, M. A. und T. A. Laursen [2002]. „A 3D contact smoothing method using Gregory patches“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 54.8, S. 1161–1194. DOI: [10.1002/nme.466](https://doi.org/10.1002/nme.466).
- Qi, L. und J. Sun [1993]. „A nonsmooth version of Newton’s method“. In: *Mathematical Programming* 58.1-3, S. 353–367. DOI: [10.1007/BF01581275](https://doi.org/10.1007/BF01581275).
- Quint, K. J. [2007]. „Numerische Behandlung plastischer Inkompressibilität bei finiter Viskoplastizität“. Diploma-thesis, Report No. 1/2007. Clausthal-Zellerfeld: Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology.
- Quint, K. J. [2012]. „Thermomechanically coupled processes for functionally graded materials: experiments, modelling, and finite element analysis using high-order DIRK-methods“. PhD-thesis, Report No. 2/2012. Clausthal-Zellerfeld: Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology.
- Quint, K. J. und S. Hartmann [2007]. „The Multiple Intermediate Configuration Approach and its Influence on DIRK/MLNA Finite Element Procedures“. In: *PAMM* 7.1, S. 4060005–4060006. DOI: [10.1002/pamm.200700098](https://doi.org/10.1002/pamm.200700098).
- Quint, K. J., S. Hartmann, S. Rothe, N. Saba und K. Steinhoff [2011]. „Experimental validation of high-order time integration for non-linear heat transfer problems“. In: *Computational Mechanics* 48.1, S. 81–96. DOI: [10.1007/s00466-011-0572-y](https://doi.org/10.1007/s00466-011-0572-y).

-
- Quint, K. J., S. Hartmann, J. D. Tebbens und A. Meister [2008]. „Efficient Finite Element Analysis of Inelastic Structures with Iterative Solvers“. In: *PAMM* 8.1, S. 10331–10332. DOI: [10.1002/pamm.200810331](https://doi.org/10.1002/pamm.200810331).
- Rabbat, G. N. B., H. Y. Hsieh und A. L. Sangiovanni-Vincentelli [1979]. „A Multilevel Newton Algorithm with Macromodeling and Latency for the Analysis of Large-Scale Nonlinear Circuits in the Time Domain“. In: *IEEE Transactions on Circuits and Systems* 26.9, S. 733–741. DOI: [10.1109/TCS.1979.1084693](https://doi.org/10.1109/TCS.1979.1084693).
- Rang, J. [2013a]. „Adaptive timestep control for the generalised- α method“. In: *Adaptive Modeling and Simulation*. Hrsg. von D. Aubry, P. Diez, B. Tie und N. Paréz. CIMNE, S. 559–570.
- Rang, J. [2013b]. „Coupling generalised- α methods: Analysis, adaptivity, and numerics“. In: *Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering V. A Conference Celebrating the 60th Birthday of Eugenio Oñate, 17-19 June 2013, Santa Eulalia, Ibiza, Spain*. Hrsg. von S. Idelsohn, M. Papadrakakis und B. Schrefler. CIMNE. Barcelona, S. 399–410.
- Rank, E., A. Düster, V. Nübel, K. Preusch und O. T. Bruhns [2005]. „High order finite elements for shells“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194.21-24, S. 2494–2512. DOI: [10.1016/j.cma.2004.07.042](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.07.042).
- Reed, K. W. und S. N. Atluri [1985]. „Constitutive modeling and computational implementation for finite strain plasticity“. In: *International Journal of Plasticity* 1.1, S. 63–87. DOI: [10.1016/0749-6419\(85\)90014-2](https://doi.org/10.1016/0749-6419(85)90014-2).
- Reese, S. [2001]. „Thermomechanische Modellierung gummiartiger Polymer-Strukturen“. Report No. F01/4. Habilitation. Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover.
- Reese, S. und S. Govindjee [1998a]. „A Theory of Finite Viscoelasticity and Numerical Aspects“. In: *International Journal of Solids and Structures* 35, S. 3455–3482.
- Reese, S. und S. Govindjee [1998b]. „Theoretical and Numerical Aspects in the Thermo-Viscoelastic Material Behaviour of Rubber-Like Polymers“. In: *Mechanics of Time-Dependent Materials* 1.4, S. 357–396. DOI: [10.1023/A:1009795431265](https://doi.org/10.1023/A:1009795431265).
- Riccus, J. und K. Schweizerhof [1996]. „Aspects of hierarchical h-adaptive dynamic analysis“. In: *Advances in Finite Element Techniques*. Hrsg. von B. H. V. Topping. Proceedings of 3rd Int. Conf. on Comput. Structures Techn. Edinburgh: Civil-Comp Press, S. 61–70. DOI: [10.4203/ccp.39.2.3](https://doi.org/10.4203/ccp.39.2.3).
- Riccus, J. [1997]. „Adaptive Methoden zur statischen und dynamischen Analyse von Flächentragwerken mit linearen Finiten Elementen“. Diss. Institute of Engineering Mechanics, University of Karlsruhe.
- Rieger, A. [2002]. „Adaptive Algorithmen für thermomechanisch gekoppelte Kontaktprobleme“. F02/1. Hannover, Deutschland: Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover.
- Rieger, A. und P. Wriggers [2004]. „Adaptive methods for thermomechanical coupled contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 59.6, S. 871–894. DOI: [10.1002/nme.900](https://doi.org/10.1002/nme.900).
- Rivlin, R. S. [1948]. „Large Elastic Deformations of Isotropic Materials I. Fundamental Concepts“. In: *Philosophical Transaction of the Royal Society of London Series A* 240, S. 459–490.

- Rivlin, R. S. und D. W. Saunders [1951]. „Large Elastic Deformations of Isotropic Materials VII. Experiments on the Deformation of Rubber“. In: *Philosophical Transaction of the Royal Society of London Series A* 243, S. 251–288.
- Romero, I. [2009]. „Thermodynamically consistent time-stepping algorithms for non-linear thermomechanical systems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.6, S. 706–732. DOI: [10.1002/nme.2588](https://doi.org/10.1002/nme.2588).
- Romero, I. [2010a]. „Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics: Part I: Monolithic integrators and their application to finite strain thermoelasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.25-28, S. 1841–1858. DOI: [10.1016/j.cma.2010.02.014](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.02.014).
- Romero, I. [2010b]. „Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics: Part II: fractional step methods“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199.33-36, S. 2235–2248. DOI: [10.1016/j.cma.2010.03.016](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.03.016).
- Rothe, S. [2015]. „Electro-Thermo-Mechanical Modeling of Field Assisted Sintering Technology: Experiments, Constitutive Modeling and Finite Element Analysis“. PhD-thesis, Report No. 1/2015. Clausthal-Zellerfeld: Institute of Applied Mechanics, Clausthal University of Technology.
- Rothe, S., P. Erbts, A. Düster und S. Hartmann [2015a]. „Monolithic and partitioned coupling schemes for thermo-viscoplasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 293, S. 375–410.
- Rothe, S., A.-W. Hamkar, K. J. Quint und S. Hartmann [2012]. „Comparison of diagonal-implicit, linear-implicit and half-explicit Runge–Kutta methods in non-linear finite element analyses“. In: *Archive of Applied Mechanics* 82.8, S. 1057–1074. DOI: [10.1007/s00419-012-0617-5](https://doi.org/10.1007/s00419-012-0617-5).
- Rothe, S. und S. Hartmann [2015]. „Automatic differentiation for stress and consistent tangent computation“. In: *Archive of Applied Mechanics* 85.8, S. 1103–1125. DOI: [10.1007/s00419-014-0939-6](https://doi.org/10.1007/s00419-014-0939-6).
- Rothe, S., S. Hartmann, A.-W. Hamkar und K. Quint [2011]. „A comparison of time adaptive integration methods for small and large strain viscoelasticity“. In: *Pamm* 11.1, S. 263–264. DOI: [10.1002/pamm.201110123](https://doi.org/10.1002/pamm.201110123).
- Rothe, S., J. H. Schmidt und S. Hartmann [2015b]. „Analytical and numerical treatment of electro-thermo-mechanical coupling“. In: *Archive of Applied Mechanics* 85.9-10, S. 1245–1264. DOI: [10.1007/s00419-014-0948-5](https://doi.org/10.1007/s00419-014-0948-5).
- Rubinstein, R. und S. N. Atluri [1983]. „Objectivity of incremental constitutive relations over finite time steps in computational finite deformation analyses“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 36.3, S. 277–290. DOI: [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(83\)90125-1](https://doi.org/10.1016/0045-7825(83)90125-1).
- Rust, W. [2016]. *Nichtlineare Finite-Elemente-Berechnungen*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden. DOI: [10.1007/978-3-658-13378-8](https://doi.org/10.1007/978-3-658-13378-8).
- Schade, H. und K. Neemann [2009]. *Tensoranalysis*. De Gruyter Lehrbuch. De Gruyter. URL: <https://books.google.com/cu/books?id=NzeJSR7nfMoC>.
- Schenk, O. und K. Gärtner [2004]. „Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO“. In: *Future Generation Computer Systems* 20.3, S. 475–487. DOI: [10.1016/j.future.2003.07.011](https://doi.org/10.1016/j.future.2003.07.011).

-
- Scherf, O. [2000]. *Numerische Simulation inelastischer Körper*. Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 20 (Rechnerunterstützte Verfahren) Nr.321. Düsseldorf: VDI-Verlag.
- Schuesser, W. E. [1991]. *The Numerical Method of Lines: Integration of Partial Differential Equations*. San Diego, CA: Academic Press Inc.
- Schmidt, J. W., W. Hoyer und C. Haufe [1985]. „Consistent approximations in Newton-type decomposition methods“. In: *Numerische Mathematik* 47.3, S. 413–425. DOI: [10.1007/BF01389589](https://doi.org/10.1007/BF01389589).
- Schwarz, H. R. [1984]. *Methode der finite Elemente*. 2nd. Stuttgart: Teubner.
- Schwarz, H. R. und N. Köckler [2011]. *Numerische Mathematik*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag. DOI: [10.1007/978-3-8348-8166-3](https://doi.org/10.1007/978-3-8348-8166-3).
- Schweizerhof, K. und A. Konyukhov [2005]. „Covariant description for frictional contact problems“. In: *Computational Mechanics* 35.3, S. 190–213. DOI: [10.1007/s00466-004-0616-7](https://doi.org/10.1007/s00466-004-0616-7).
- Schweizerhof, K. und E. Ramm [1984]. „Displacement dependent pressure loads in nonlinear finite element analyses“. In: *Computers and Structures* 18.6, S. 1099–1114. DOI: [10.1016/0045-7949\(84\)90154-8](https://doi.org/10.1016/0045-7949(84)90154-8).
- Scott, L. R. und S. Zhang [1990]. „Finite element interpolation of nonsmooth functions satisfying boundary conditions“. In: *Mathematics of Computation* 54.190, S. 483–483. DOI: [10.1090/S0025-5718-1990-1011446-7](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1990-1011446-7).
- Scott, M. A., M. J. Borden, C. V. Verhoosel, T. W. Sederberg und T. J. R. Hughes [2011]. „Isogeometric finite element data structures based on Bézier extraction of T-splines“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 88.2, S. 126–156. DOI: [10.1002/nme.3167](https://doi.org/10.1002/nme.3167).
- Sedlan, K. [2001]. „Viskoelastisches Materialverhalten von Elastomerwerkstoffen: Experimentelle Untersuchung und Modellbildung“. Bericht des Instituts Mechanik 2/2001. Gesamthochschule Kassel.
- Seifert, T. und G. Maier [2008]. „Consistent linearization and finite element implementation of an incrementally objective canonical form return mapping algorithm for large deformation inelasticity“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 75.6, S. 690–708. DOI: [10.1002/nme.2270](https://doi.org/10.1002/nme.2270).
- Seifert, T., T. Schenk und I. Schmidt [2007]. „Efficient and modular algorithms in modeling finite inelastic deformations: Objective integration, parameter identification and sub-stepping techniques“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 196.17-20, S. 2269–2283. DOI: [10.1016/j.cma.2006.12.002](https://doi.org/10.1016/j.cma.2006.12.002).
- Seitz, A., W. A. Wall und A. Popp [2017]. „Nitsche’s method for finite deformation thermo-mechanical contact“. In: *Proceedings of 7th GACM Colloquium on Computational Mechanics, Stuttgart, Germany, October 11-13, 2017*. Hrsg. von M. v. Scheven, M.-A. Keip und N. Karajan. Institute for Structural Mechanics, University of Stuttgart, Stuttgart, S. 134–137.
- Seitz, A., P. Farah, J. Kremheller, B. I. Wohlmuth, W. A. Wall und A. Popp [2016]. „Isogeometric dual mortar methods for computational contact mechanics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 301, S. 259–280. DOI: [10.1016/j.cma.2015.12.018](https://doi.org/10.1016/j.cma.2015.12.018).

- Seshaiyer, P. und M. Suri [2000a]. „hp submeshing via non-conforming finite element methods“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 189.3, S. 1011–1030. DOI: [10.1016/S0045-7825\(99\)00414-4](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00414-4).
- Seshaiyer, P. und M. Suri [2000b]. „Uniform h - p convergence results for the mortar finite element method“. In: *Mathematics of Computation* 69.230, S. 521–547. DOI: [10.1090/S0025-5718-99-01083-2](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-99-01083-2).
- Sguazzo, C., M. Harhash, M. Grafenhorst, H. Palkowski und S. Hartmann [2014]. „Deep drawing of a layered composite: material characterization and finite-element simulation“. In: *PAMM* 14.1, S. 245–246. DOI: [10.1002/pamm.201410110](https://doi.org/10.1002/pamm.201410110).
- Shampine, L. F. [1999]. „Conservation laws and the numerical solution of ODEs, II“. In: *Computers and Mathematics with Applications* 38.2, S. 61–72. DOI: [10.1016/S0898-1221\(99\)00183-2](https://doi.org/10.1016/S0898-1221(99)00183-2).
- Shampine, L. F. [1986]. „Conservation laws and the numerical solution of ODEs“. In: *Computers and Mathematics with Applications* 12.5-6, S. 1287–1296. DOI: [10.1016/0898-1221\(86\)90253-1](https://doi.org/10.1016/0898-1221(86)90253-1).
- Sharma, N. C. und S. Manohar [1992]. „Line clipping revisited: Two efficient algorithms based on simple geometric observations“. In: *Computers and Graphics* 16.1, S. 51–54. DOI: [10.1016/0097-8493\(92\)90071-3](https://doi.org/10.1016/0097-8493(92)90071-3).
- Sharp, P. W., J. M. Fine und K. Burrage [1990]. „Two-stage and Three-stage Diagonally Implicit Runge-Kutta Nyström Methods of Orders Three and Four“. In: *IMA Journal of Numerical Analysis* 10.4, S. 489–504. DOI: [10.1093/imanum/10.4.489](https://doi.org/10.1093/imanum/10.4.489).
- Signorini, A. [1933]. „Sopra alcune questioni di elastostatica“. In: *Atti della Società Italiana per il Progresso delle Scienze*.
- Simo, J. C. [1987]. „On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: formulation and computational aspects“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 60, S. 153–173.
- Simo, J. C. und F. Armero [1992]. „Geometrically non-linear enhanced strain mixed methods and the method of incompatible modes“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 33.7, S. 1413–1449. DOI: [10.1002/nme.1620330705](https://doi.org/10.1002/nme.1620330705).
- Simo, J. C. und T. J. R. Hughes [1998]. *Computational Inelasticity*. 1st. New York: Springer.
- Simo, J. C. und T. A. Laursen [1992]. „An augmented lagrangian treatment of contact problems involving friction“. In: *Computers and Structures* 42.1, S. 97–116. DOI: [10.1016/0045-7949\(92\)90540-G](https://doi.org/10.1016/0045-7949(92)90540-G).
- Simo, J. C. und C. Miehe [1992]. „Associative coupled thermoplasticity at finite strains: Formulation, numerical analysis and implementation“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 98.1, S. 41–104. DOI: [DOI: 10.1016/0045-7825\(92\)90170-0](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90170-0).
- Simo, J. C. und K. S. Pister [1984]. „Remarks on rate constitutive equations for finite deformation problems: Computational implications“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 46.2, S. 201–215. DOI: [10.1016/0045-7825\(84\)90062-8](https://doi.org/10.1016/0045-7825(84)90062-8).
- Simo, J. C. und N. Tarnow [1992]. „The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics“. In: *ZAMP Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik* 43.5, S. 757–792. DOI: [10.1007/BF00913408](https://doi.org/10.1007/BF00913408).

-
- Simo, J. C. und N. Tarnow [1994]. „A new energy and momentum conserving algorithm for the non-linear dynamics of shells“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 37.15, S. 2527–2549. DOI: [10.1002/nme.1620371503](https://doi.org/10.1002/nme.1620371503).
- Simo, J. C., N. Tarnow und M. Doblare [1995]. „Non-linear dynamics of three-dimensional rods: Exact energy and momentum conserving algorithms“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 38.9, S. 1431–1473. DOI: [10.1002/nme.1620380903](https://doi.org/10.1002/nme.1620380903).
- Simo, J. C., N. Tarnow und K. K. Wong [1992]. „Exact energy-momentum conserving algorithms and symplectic schemes for nonlinear dynamics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 100.1, S. 63–116. DOI: [10.1016/0045-7825\(92\)90115-Z](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90115-Z).
- Simo, J. C. und R. L. Taylor [1982]. „Penalty function formulations for incompressible nonlinear elastostatics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 35, S. 107–118.
- Simo, J. C. und R. L. Taylor [1985]. „Consistent Tangent Operators for Rate-Independent Elastoplasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 48, S. 101–118.
- Simo, J. C. und R. L. Taylor [1991]. „Quasi-Incompressible Finite Elasticity in Principal Stretches. Continuum Basis and Numerical Algorithms“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 85.3, S. 273–310. DOI: [10.1016/0045-7825\(91\)90100-K](https://doi.org/10.1016/0045-7825(91)90100-K).
- Simo, J. C., R. L. Taylor und K. S. Pister [1985a]. „Variational and projection methods for the volume constraint in finite deformation elasto-plasticity“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 51.1-3, S. 177–208. DOI: [10.1016/0045-7825\(85\)90033-7](https://doi.org/10.1016/0045-7825(85)90033-7).
- Simo, J. C., R. L. Taylor und P. Wriggers [1991]. „A note on finite-element implementation of pressure boundary loading“. In: *Communications in Applied Numerical Methods* 7.7, S. 513–525. DOI: [10.1002/cnm.1630070703](https://doi.org/10.1002/cnm.1630070703).
- Simo, J. C. und K. K. Wong [1991]. „Unconditionally stable algorithms for rigid body dynamics that exactly preserve energy and momentum“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 31.1, S. 19–52. DOI: [10.1002/nme.1620310103](https://doi.org/10.1002/nme.1620310103).
- Simo, J. C., P. Wriggers und R. L. Taylor [1985b]. „A perturbed Lagrangian formulation for the finite element solution of contact problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 50.2, S. 163–180. DOI: [10.1016/0045-7825\(85\)90088-X](https://doi.org/10.1016/0045-7825(85)90088-X).
- Skala, V. [1993]. „An efficient algorithm for line clipping by convex polygon“. In: *Computers and Graphics* 17.4, S. 417–421. DOI: [10.1016/0097-8493\(93\)90030-D](https://doi.org/10.1016/0097-8493(93)90030-D).
- Sobkow, M. S., P. Pospisil und Y.-H. Yang [1987]. „A fast two-dimensional line clipping algorithm via line encoding“. In: *Computers and Graphics* 11.4, S. 459–467. DOI: [10.1016/0097-8493\(87\)90061-6](https://doi.org/10.1016/0097-8493(87)90061-6).
- Söderlind, G. [2002]. „Automatic Control and Adaptive Time-Stepping“. In: *Numerical Algorithms* 31.1, S. 281–310. DOI: [10.1023/A:1021160023092](https://doi.org/10.1023/A:1021160023092).
- Söderlind, G. [2003]. „Digital filters in adaptive time-stepping“. In: *ACM Transactions on Mathematical Software* 29.1, S. 1–26. DOI: [10.1145/641876.641877](https://doi.org/10.1145/641876.641877).

- Söderlind, G. und L. Wang [2006a]. „Adaptive time-stepping and computational stability“. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 185.2, S. 225–243. DOI: [10.1016/j.cam.2005.03.008](https://doi.org/10.1016/j.cam.2005.03.008).
- Söderlind, G. und L. Wang [2006b]. „Evaluating numerical ODE/DAE methods, algorithms and software“. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 185.2, S. 244–260. DOI: [10.1016/j.cam.2005.03.009](https://doi.org/10.1016/j.cam.2005.03.009).
- Stadler, M., G. A. Holzapfel und J. Korelc [2003]. „Cn continuous modelling of smooth contact surfaces using NURBS and application to 2D problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 57.15, S. 2177–2203. DOI: [10.1002/nme.776](https://doi.org/10.1002/nme.776).
- Stenberg, R. [1998]. „Mortaring by a method of J. A. Nitsche“. In: *Computational Mechanics: New Trends and Applications*. Hrsg. von S. Idelsohn, E. Oñate und E. Dvorkin. CIMNE. Barcelona.
- Sternel, D. C., M. Schäfer, M. Heck und S. Yigit [2008]. „Efficiency and accuracy of fluid-structure interaction simulations using an implicit partitioned approach“. In: *Computational Mechanics* 43.1, S. 103–113. DOI: [10.1007/s00466-008-0278-y](https://doi.org/10.1007/s00466-008-0278-y).
- Strang, G. und G. J. Fix [1973]. *An Analysis of the Finite Element Method*. 1st. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall, Inc.
- Strehmel, K., R. Weiner und H. Podhaisky [2012]. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. 2nd. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag. DOI: [10.1007/978-3-8348-2263-5](https://doi.org/10.1007/978-3-8348-2263-5).
- Strömberg, N., L. Johansson und A. Klarbring [1996]. „Derivation and analysis of a generalized standard model for contact, friction and wear“. In: *International Journal of Solids and Structures* 33.13, S. 1817–1836. DOI: [10.1016/0020-7683\(95\)00140-9](https://doi.org/10.1016/0020-7683(95)00140-9).
- Stupkiewicz, S. [2009]. „Finite element treatment of soft elastohydrodynamic lubrication problems in the finite deformation regime“. In: *Computational Mechanics* 44.5, S. 605–619. DOI: [10.1007/s00466-009-0394-3](https://doi.org/10.1007/s00466-009-0394-3).
- Suri, M. [1996]. „Analytical and computational assessment of locking in the hp finite element method“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 133.3-4, S. 347–371. DOI: [10.1016/0045-7825\(95\)00947-7](https://doi.org/10.1016/0045-7825(95)00947-7).
- Sutherland, I. E. und G. W. Hodgman [1974]. „Reentrant polygon clipping“. In: *Communications of the ACM* 17.1, S. 32–42. DOI: [10.1145/360767.360802](https://doi.org/10.1145/360767.360802).
- Systèmes, D., Hrsg. [2014]. *Abaqus 6.14 Online Documentation*.
- Szabó, B. A. [1979]. „Some recent developments in finite element analysis“. In: *Computers and Mathematics with Applications* 5.2, S. 99–115. DOI: [10.1016/0898-1221\(79\)90063-4](https://doi.org/10.1016/0898-1221(79)90063-4).
- Szabó, B. A. und R. L. Actis [2009]. „On the role of hierarchic spaces and models in verification and validation“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.13-14, S. 1273–1280. DOI: [10.1016/j.cma.2008.04.025](https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.04.025).
- Szabó, B. A. und I. Babuška [1991]. *Finite Element Analysis*. New York: Wiley.
- Szabó, B. A. und I. Babuška [2011]. *Introduction to Finite Element Analysis*. 1. Aufl. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, S. 368. DOI: [10.1002/9781119993834](https://doi.org/10.1002/9781119993834).
- Szabó, B. A., I. Babuška und B. K. Chayapathy [1989]. „Stress computations for nearly incompressible materials by the p-version of the finite element method“. In: *Inter-*

-
- national Journal for Numerical Methods in Engineering* 28.9, S. 2175–2190. DOI: [10.1002/nme.1620280913](https://doi.org/10.1002/nme.1620280913).
- Szabó, B., A. Düster und E. Rank [2004]. „The p-Version of the Finite Element Method“. In: *Encyclopedia of Computational Mechanics Second Edition*. Hrsg. von E. Stein, R. de Borst und T. J. R. Hughes. John Wiley & Sons, Ltd, S. 119–139. DOI: [10.1002/0470091355.ecm003g](https://doi.org/10.1002/0470091355.ecm003g).
- Szabó, I. [1996]. *Geschichte der mechanischen Prinzipien und ihrer wichtigsten Anwendungen*. Basel: Birkhäuser Verlag.
- Tarnow, N. [1993]. „Energy and Momentum Conserving Algorithms for Hamiltonian Systems in the Nonlinear Dynamics of Solids“. Sudam Report No. 93-4. Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford California. URL: <https://books.google.de/books?id=PioEAAAAIAAJ>.
- Taylor, R. L. [2011]. „Isogeometric analysis of nearly incompressible solids“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 87.1-5, S. 273–288. DOI: [10.1002/nme.3048](https://doi.org/10.1002/nme.3048).
- Taylor, R. L. und P. Papadopoulos [1991]. „On a patch test for contact problems in two dimensions“. In: *Computational Methods in Nonlinear Mechanics*. Hrsg. von P. Wriggers und W. Wagner. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, S. 690–702.
- Taylor, R. L. und P. Wriggers [1999]. *Smooth surface discretization for large deformation frictionless contact*. Technical Report UCB/SEMM-99-04. Berkeley: University of California.
- Taylor, R. L. [2013]. *FEAP – A Finite Element Analysis Program, Version 8.4 User Manual*. v.8.4. Department of Civil und Environmental Engineering, University of California at Berkeley.
- Temizer, I. [2012]. „A mixed formulation of mortar-based frictionless contact“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 223-224, S. 173–185. DOI: [10.1016/j.cma.2012.02.017](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.02.017).
- Temizer, I. [2013]. „A mixed formulation of mortar-based contact with friction“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 255, S. 183–195. DOI: [10.1016/j.cma.2012.12.002](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.12.002).
- Temizer, I., P. Wriggers und T. J. R. Hughes [2011]. „Contact treatment in isogeometric analysis with NURBS“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200.9-12, S. 1100–1112. DOI: [10.1016/j.cma.2010.11.020](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.11.020).
- Temizer, I., P. Wriggers und T. J. R. Hughes [2012]. „Three-dimensional mortar-based frictional contact treatment in isogeometric analysis with NURBS“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 209-212, S. 115–128. DOI: [10.1016/j.cma.2011.10.014](https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.10.014).
- Teschner, M. et al. [2005]. „Collision Detection for Deformable Objects“. In: *Computer Graphics Forum* 24.1, S. 61–81. DOI: [10.1111/j.1467-8659.2005.00829.x](https://doi.org/10.1111/j.1467-8659.2005.00829.x).
- Timoschenko, S. P. und J. N. Goodier [1970]. *Theory of Elasticity*. 3rd. New York: McGraw-Hill.
- Truesdell, C. und W. Noll [1965a]. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Handbuch der Physik III/3. Berlin: Springer.
- Truesdell, C. und W. Noll [1965b]. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Bd. III/3. Encyclopedia of Physics. Berlin: Springer Verlag.

- Truesdell, C. und R. A. Toupin [1960]. *The Classical Field Theories*. Bd. III/1. Encyclopedia of Physics. Springer Verlag.
- Tsakmakis, C. und A. Willuweit [2004]. „A comparative study of kinematic hardening rules at finite deformations“. In: *International Journal of Non-Linear Mechanics* 39.4, S. 539–554. DOI: [10.1016/S0020-7462\(02\)00221-4](https://doi.org/10.1016/S0020-7462(02)00221-4).
- Tschoegl, N. [1989]. *The Phenomenological Theory of Linear Viscoelastic Material Behaviour*. New York: Springer Verlag.
- Tur, M., F. J. Fuenmayor und P. Wriggers [2009]. „A mortar-based frictional contact formulation for large deformations using Lagrange multipliers“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.37-40, S. 2860–2873. DOI: [10.1016/j.cma.2009.04.007](https://doi.org/10.1016/j.cma.2009.04.007).
- Tur, M., E. Giner, F. J. Fuenmayor und P. Wriggers [2012]. „2D contact smooth formulation based on the mortar method“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 247-248, S. 1–14. DOI: [10.1016/j.cma.2012.08.002](https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.08.002).
- Turska, E. und B. A. Schrefler [1993]. „On convergence conditions of partitioned solution procedures for consolidation problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 106.1-2, S. 51–63. DOI: [10.1016/0045-7825\(93\)90184-Y](https://doi.org/10.1016/0045-7825(93)90184-Y).
- Ubach, P.-A., C. Estruch und J. Garcia-Espinosa [2013]. „On the interpolation of normal vectors for triangle meshes“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 96.4, S. 247–268. DOI: [10.1002/nme.4567](https://doi.org/10.1002/nme.4567).
- Vejchodský, T. und P. Šolín [2008]. „Static condensation, partial orthogonalization of basis functions, and ILU preconditioning in the hp-FEM“. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 218.1, S. 192–200. DOI: [10.1016/j.cam.2007.04.044](https://doi.org/10.1016/j.cam.2007.04.044).
- Weber, G., A. M. Lush, A. Zavaliangos und L. Anand [1990]. „An objective time-integration procedure for isotropic rate-independent and rate-dependent elastic-plastic constitutive equations“. In: *International Journal of Plasticity* 6.6, S. 701–744. DOI: [10.1016/0749-6419\(90\)90040-L](https://doi.org/10.1016/0749-6419(90)90040-L).
- Weber, G. und L. Anand [1990]. „Finite deformation constitutive equations and a time integration procedure for isotropic, hyperelastic-viscoplastic solids“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 79.2, S. 173–202. DOI: [10.1016/0045-7825\(90\)90131-5](https://doi.org/10.1016/0045-7825(90)90131-5).
- Weißenfels, C. [2012]. „Contact methods integrating plasticity models with application to soil mechanics“. B13/1. Institut für Kontinuumsmechanik, Hannover: Leibniz Universität Hannover.
- Weißenfels, C. [2013]. „Contact methods integrating plasticity models with application to soil mechanics“. Bericht Nr. B 13/1. Leibniz Universität Hannover.
- Weißenfels, C. und P. Wriggers [2015]. „Methods to project plasticity models onto the contact surface applied to soil structure interactions“. In: *Computers and Geotechnics* 65, S. 187–198. DOI: [10.1016/j.compgeo.2014.11.015](https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2014.11.015).
- Wensch, J. [2003]. „Beiträge zur geometrischen Integration und Anwendungen in der numerischen Simulation“. Habilitationsschrift. Halle-Wittenberg: Martin-Luther Universität.
- Werner, H. und H. Arndt [1986]. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 1st. Berlin: Springer.

-
- Wiberg, N.-E., L. Zeng und X. Li [1992]. „Error estimation and adaptivity in elastodynamics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 101.1-3, S. 369–395. DOI: [10.1016/0045-7825\(92\)90030-N](https://doi.org/10.1016/0045-7825(92)90030-N).
- Wiling, C. und M. Bischoff [2017]. „Alternative integration algorithms for three-dimensional mortar contact“. In: *Computational Mechanics* 59.2, S. 203–218. DOI: [10.1007/s00466-016-1345-4](https://doi.org/10.1007/s00466-016-1345-4).
- Williams, J. R. und R. O’Connor [1999]. „Discrete element simulation and the contact problem“. In: *Archives of Computational Methods in Engineering* 6.4, S. 279–304. DOI: [10.1007/BF02818917](https://doi.org/10.1007/BF02818917).
- Willner, K. [2003]. *Kontinuums- und Kontaktmechanik, Synthetische und analytische Darstellung*. Berlin: Springer.
- Wilson, E. L. [1968]. *A Computer Program for the Dynamic Stress Analysis of Underground Structures*. SESM Report No. 68-1. Berkeley: Division of Structural Engineering und Structural Mechanics, University of California.
- Wittekindt, J. [1991]. „Die numerische Lösung von Anfangs-Randwertproblemen zur Beschreibung inelastischen Werkstoffverhaltens“. Doctoral Thesis. Department of Mathematics, University of Darmstadt.
- Wohlmuth, B. I., A. Popp, M. W. Gee und W. A. Wall [2012]. „An abstract framework for a priori estimates for contact problems in 3D with quadratic finite elements“. In: *Computational Mechanics* 49.6, S. 735–747. DOI: [10.1007/s00466-012-0704-z](https://doi.org/10.1007/s00466-012-0704-z).
- Wohlmuth, B. [2001]. *Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition*. Bd. 17. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, S. 212. DOI: [10.1007/978-3-642-56767-4](https://doi.org/10.1007/978-3-642-56767-4).
- Wohlmuth, B. [2011]. „Variationally consistent discretization schemes and numerical algorithms for contact problems“. In: *Acta Numerica* 20, S. 569–734. DOI: [10.1017/S0962492911000079](https://doi.org/10.1017/S0962492911000079).
- Wohlmuth, B. I. [2000]. „A Mortar Finite Element Method Using Dual Spaces for the Lagrange Multiplier“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 38.3, S. 989–1012. DOI: [10.1137/S0036142999350929](https://doi.org/10.1137/S0036142999350929).
- Wood, W. L., M. Bossak und O. C. Zienkiewicz [1980]. „An alpha modification of Newmark’s method“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 15.10, S. 1562–1566. DOI: [10.1002/nme.1620151011](https://doi.org/10.1002/nme.1620151011).
- Wood, W. L. und M. E. Oduor [1988]. „Stability properties of some algorithms for the solution of nonlinear dynamic vibration equations“. In: *Communications in Applied Numerical Methods* 4.2, S. 205–212. DOI: [10.1002/cnm.1630040211](https://doi.org/10.1002/cnm.1630040211).
- Wriggers, P. [1988]. „Konsistente Linearisierungen in der Kontinuumsmechanik und ihre Anwendung auf die Finite-Element-Methode“. Bericht-Nr. F88/4. Universität Hannover.
- Wriggers, P. [1996]. „Finite element methods for contact problems with friction“. In: *Tribology International* 29.8, S. 651–658. DOI: [10.1016/0301-679X\(96\)00011-4](https://doi.org/10.1016/0301-679X(96)00011-4).
- Wriggers, P., L. Krstulovic-Opara und J. Korelc [2001]. „Smooth C1-interpolations for two-dimensional frictional contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 51.12, S. 1469–1495. DOI: [10.1002/nme.227](https://doi.org/10.1002/nme.227).

- Wriggers, P. und C. Miehe [1992]. „On the Treatment of Contact Constraints within Coupled Thermomechanical Analysis“. In: *Finite Inelastic Deformations — Theory and Applications*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, S. 333–347. DOI: [10.1007/978-3-642-84833-9_{30}](https://doi.org/10.1007/978-3-642-84833-9_{30}).
- Wriggers, P. und C. Miehe [1994]. „Contact constraints within coupled thermomechanical analysis-A finite element model“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 113.3-4, S. 301–319. DOI: [10.1016/0045-7825\(94\)90051-5](https://doi.org/10.1016/0045-7825(94)90051-5).
- Wriggers, P., C. Miehe, M. Kleiber und J. C. Simo [1992]. „On the coupled thermomechanical treatment of necking problems via finite element methods“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 33.4, S. 869–883. DOI: [10.1002/nme.1620330413](https://doi.org/10.1002/nme.1620330413).
- Wriggers, P. und O. Scherf [1995]. „An adaptive finite element algorithm for contact problems in plasticity“. In: *Computational Mechanics* 17.1-2, S. 88–97. DOI: [10.1007/BF00356481](https://doi.org/10.1007/BF00356481).
- Wriggers, P. und J. C. Simo [1985]. „A note on tangent stiffness for fully nonlinear contact problems“. In: *Communications in Applied Numerical Methods* 1.5, S. 199–203. DOI: [10.1002/cnm.1630010503](https://doi.org/10.1002/cnm.1630010503).
- Wriggers, P., T. Vu Van und E. Stein [1990]. „Finite element formulation of large deformation impact-contact problems with friction“. In: *Computers and Structures* 37.3, S. 319–331. DOI: [10.1016/0045-7949\(90\)90324-U](https://doi.org/10.1016/0045-7949(90)90324-U).
- Wriggers, P. und G. Zavarise [1993]. „Thermomechanical contact—a rigorous but simple numerical approach“. In: *Computers and Structures* 46.1, S. 47–53. DOI: [10.1016/0045-7949\(93\)90166-B](https://doi.org/10.1016/0045-7949(93)90166-B).
- Wriggers, P. und G. Zavarise [2004]. „Computational Contact Mechanics“. In: *Encyclopedia of Computational Mechanics*. Hrsg. von E. Stein, R. de Borst und T. J. R. Hughes. John Wiley & Sons, Ltd, S. 195–226. DOI: [10.1002/9781119176817](https://doi.org/10.1002/9781119176817).
- Wriggers, P. und G. Zavarise [2007]. „A formulation for frictionless contact problems using a weak form introduced by Nitsche“. In: *Computational Mechanics* 41.3, S. 407–420. DOI: [10.1007/s00466-007-0196-4](https://doi.org/10.1007/s00466-007-0196-4).
- Wriggers, P. [2006]. *Computational Contact Mechanics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. DOI: [10.1007/978-3-540-32609-0](https://doi.org/10.1007/978-3-540-32609-0).
- Wriggers, P. [2008]. *Nonlinear Finite Element Methods*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. DOI: [10.1007/978-3-540-71001-1](https://doi.org/10.1007/978-3-540-71001-1).
- Yang, B. und T. A. Laursen [2007]. „A contact searching algorithm including bounding volume trees applied to finite sliding mortar formulations“. In: *Computational Mechanics* 41.2, S. 189–205. DOI: [10.1007/s00466-006-0116-z](https://doi.org/10.1007/s00466-006-0116-z).
- Yang, B. und T. A. Laursen [2008]. „A large deformation mortar formulation of self contact with finite sliding“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.6-8, S. 756–772. DOI: [10.1016/j.cma.2007.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.09.004).
- Yang, B. und T. A. Laursen [2009]. „A mortar-finite element approach to lubricated contact problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.47-48, S. 3656–3669. DOI: [10.1016/j.cma.2009.07.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2009.07.008).
- Yang, B., T. A. Laursen und X. Meng [2005]. „Two dimensional mortar contact methods for large deformation frictional sliding“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 62.9, S. 1183–1225. DOI: [10.1002/nme.1222](https://doi.org/10.1002/nme.1222).

-
- Yastrebov, V. und P. Breitenkopf [2013]. *Numerical Methods in Contact Mechanics*. Hrsg. von V. A. Yastrebov und P. Breitenkopf. Hoboken, NJ USA: John Wiley & Sons, Inc. DOI: [10.1002/9781118647974](https://doi.org/10.1002/9781118647974).
- Yosibash, Z., S. Hartmann, U. Heisserer, A. Düster, E. Rank und M. Szanto [2007]. „Axisymmetric pressure boundary loading for finite deformation analysis using p-FEM“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 196.7, S. 1261–1277. DOI: [10.1016/j.cma.2006.09.006](https://doi.org/10.1016/j.cma.2006.09.006).
- Zavarise, G. und L. De Lorenzis [2012]. „An augmented Lagrangian algorithm for contact mechanics based on linear regression“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 91.8, S. 825–842. DOI: [10.1002/nme.4294](https://doi.org/10.1002/nme.4294).
- Zavarise, G. und P. Wriggers [1998]. „A segment-to-segment contact strategy“. In: *Mathematical and Computer Modelling* 28.4-8, S. 497–515. DOI: [10.1016/S0895-7177\(98\)00138-1](https://doi.org/10.1016/S0895-7177(98)00138-1).
- Zavarise, G. und P. Wriggers [1999]. „A superlinear convergent augmented Lagrangian procedure for contact problems“. In: *Engineering Computations* 16.1, S. 88–119. DOI: [10.1108/02644409910251292](https://doi.org/10.1108/02644409910251292).
- Zavarise, G., P. Wriggers und B. A. Schrefler [1995]. „On augmented Lagrangian algorithms for thermomechanical contact problems with friction“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 38.17, S. 2929–2949. DOI: [10.1002/nme.1620381706](https://doi.org/10.1002/nme.1620381706).
- Zavarise, G., P. Wriggers und B. A. Schrefler [1998]. „A method for solving contact problems“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 42.3, S. 473–498. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19980615\)42:3<473::AID-NME367>3.0.CO;2-A](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19980615)42:3<473::AID-NME367>3.0.CO;2-A).
- Zavarise, G., P. Wriggers, E. Stein und B. A. Schrefler [1992]. „Real contact mechanisms and finite element formulation - a coupled thermomechanical approach“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 35.4, S. 767–785. DOI: [10.1002/nme.1620350409](https://doi.org/10.1002/nme.1620350409).
- Zavarise, G. und L. De Lorenzis [2011]. „The Contact Patch Test for Linear Contact Pressure Distributions in 2D Frictionless Contact“. In: *Trends in Computational Contact Mechanics*. Hrsg. von G. Zavarise und P. Wriggers. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, S. 79–100. DOI: [10.1007/978-3-642-22167-5_5](https://doi.org/10.1007/978-3-642-22167-5_5).
- Zavarise, G. und L. De Lorenzis [2009a]. „A modified node-to-segment algorithm passing the contact patch test“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.4, S. 379–416. DOI: [10.1002/nme.2559](https://doi.org/10.1002/nme.2559).
- Zavarise, G. und L. De Lorenzis [2009b]. „The node-to-segment algorithm for 2D frictionless contact: Classical formulation and special cases“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.41-44, S. 3428–3451. DOI: [10.1016/j.cma.2009.06.022](https://doi.org/10.1016/j.cma.2009.06.022).
- Zeng, L. F., N.-E. Wiberg, X. D. Li und Y. M. Xie [1992]. „A posteriori local error estimation and adaptive time-stepping for newmark integration in dynamic analysis“. In: *Earthquake Engineering and Structural Dynamics* 21.7, S. 555–571. DOI: [10.1002/eqe.4290210701](https://doi.org/10.1002/eqe.4290210701).

- Zhi-Hua, Z. und L. Nilsson [1989]. „A contact searching algorithm for general contact problems“. In: *Computers & Structures* 33.1, S. 197–209. DOI: [10.1016/0045-7949\(89\)90141-7](https://doi.org/10.1016/0045-7949(89)90141-7).
- Zienkiewicz, O. C., R. L. Taylor und D. Fox [2014]. *The Finite Element Method for Solid and Structural Mechanics*. 7. Aufl. Elsevier, S. 624. DOI: [10.1016/C2009-0-26332-X](https://doi.org/10.1016/C2009-0-26332-X).
- Zienkiewicz, O. C., R. L. Taylor und J. Z. Zhu [2013]. *The Finite Element Method: its Basis and Fundamentals*. Elsevier, S. 714. DOI: [10.1016/C2009-0-24909-9](https://doi.org/10.1016/C2009-0-24909-9). arXiv: [arXiv:1011.1669v3](https://arxiv.org/abs/1011.1669v3).
- Zienkiewicz, O. C., W. L. Wood, N. W. Hine und R. L. Taylor [1984]. „A unified set of single step algorithms. Part 1: General formulation and applications“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 20.8, S. 1529–1552. DOI: [10.1002/nme.1620200814](https://doi.org/10.1002/nme.1620200814).
- Zienkiewicz, O. C. und Y. M. Xie [1991]. „A simple error estimator and adaptive time stepping procedure for dynamic analysis“. In: *Earthquake Engineering and Structural Dynamics* 20, S. 871–887. URL: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/nme.1620240206/abstract>.

Liste von Publikationen

- [1] M. Grafenhorst and S. Hartmann. “Time-adaptive non-linear finite-element analysis of contact problems”. In: *Proceedings of 7th GACM Colloquium on Computational Mechanics, Stuttgart, Germany, October 11-13, 2017*. Ed. by M. v. Scheven, M.-A. Keip, and N. Karajan. Institute for Structural Mechanics, University of Stuttgart, Stuttgart, 2017, pp. 152–155.
- [2] M. Grafenhorst, S. Hartmann, and J. Rang. “Second-order time-integration in inelastic dynamical systems”. In: *PAMM* 14.1 [12/2014], pp. 217–218. DOI: 10.1002/pamm.201410096.
- [3] M. Grafenhorst, S. Hartmann, and J. Rang. “Time-adaptive non-linear finite-element computations for thermo-mechanically coupled analysis in inelastic dynamical systems”. In: *PAMM* 16.1 [10/2016], pp. 443–444. DOI: 10.1002/pamm.201610210.
- [4] M. Grafenhorst, J. Rang, and S. Hartmann. “Time-adaptive finite element simulations of dynamical problems for temperature-dependent materials”. In: *Journal of Mechanics of Materials and Structures* 12.1 [01/2017], pp. 57–91. DOI: 10.2140/jomms.2017.12.57.
- [5] C. Sguazzo, M. Harhash, M. Grafenhorst, H. Palkowski, and S. Hartmann. “Deep drawing of a layered composite: material characterization and finite-element simulation”. In: *PAMM* 14.1 [12/2014], pp. 245–246. DOI: 10.1002/pamm.201410110.

Matthias Grafenhorst

Persönliche Angaben

Geburtsdatum 09.07.1985
Geburtsort Nordhausen
Staatsangehörigkeit deutsch
Familienstand ledig

Studium & Ausbildung

- 05/11–10/18 **Promotion**, *Technische Universität Clausthal, Institut für Technische Mechanik, Abteilung Festkörpermechanik.*
Betreuer: Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Hartmann.
Promotionsthema: Zeitadaptive Finite-Elemente-Berechnungen thermomechanisch gekoppelter Problemstellungen sowie Mortarkontakt.
- 10/2004–03/2011 **Diplom Maschinenbau (Dipl.-Ing.)**, *Technische Universität Clausthal.*
Vertiefungsrichtung: Konstruktion, Fertigung und Betrieb.
Studienschwerpunkte: Festkörpermechanik, Betriebsfestigkeit, Simulation.
Studienarbeit: *Numerische Simulation von Gleitlagern.*
Studienarbeit: *Elasto-hydrodynamische (EHD) Simulation von Radialgleitlagern.*
Diplomarbeit: *Dynamische Modellbildung, Simulation und Validierung von Schwingungsdämpferventilen in Zweirohrschwingungsdämpfern.*
- 09/2007–01/2009 **Ausbildung Industriemechaniker**, *Volkswagen AG, Werk Braunschweig.*
Fachrichtung: Instandhaltung.
Beschreibung: Modulare Ausbildung zum Industriemechaniker im Rahmen des Sonderausbildungsganges „Studium im Praxisverbund, Fachrichtung Maschinenbau“.
- 1996–2004 **Allgemeine Hochschulreife**, *Herder Gymnasium, Nordhausen.*
- 1992–1996 **Grundschule**, *Grundschule Klettenberg, Klettenberg.*

Berufserfahrung, Praktika & Nebentätigkeiten

- 05/11–01/18 **Wissenschaftlicher Mitarbeiter**, *Technische Universität Clausthal, Institut für Technische Mechanik, Abteilung Festkörpermechanik unter Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Hartmann.*
Forschungstätigkeiten: Entwicklung komplexer FEM-Berechnungswerkzeuge, Integration eigener Entwicklungen (Softwaremodule) in kommerzielle Berechnungsprogramme, Durchführung komplexer Struktur- und gekoppelter Mehrfeldberechnungen, Implementierung und Applikation von neuartigen Kontaktdiskretisierungstechniken, Didaktisches Vor- und Aufbereiten von Lehrmaterialien sowie eigenverantwortliches Abhalten von Übungen.
- 10/10–03/11 **Praktikant & Diplomand**, *Volkswagen AG, Braunschweig.*
Praktikum in der Dämpferentwicklung des Volkswagenwerks Braunschweig. Betreuung eines Dämpferprüfstands. Experimentelle Ermittlung von Stoßdämpferkennlinien. Modellbildung, Simulation und Validierung von Schwingungsdämpferventilen in Stoßdämpfern.
- 09/07–01/09 **Auszubildender**, *Volkswagen AG, Braunschweig.*
Berufsausbildung zum Industriemechaniker mit der Fachrichtung Instandhaltung.